ATOMISTIKA

SLOBODAN MACURA
JELENA RADIĆ-PERIĆ

ATOMISTIKA

DRUGO PRERAĐENO I DOPUNJENO IZDANJE

BEOGRAD • 2004

ATOMISTIKA

Autori:
Prof. dr SLOBODAN MACURA
Prof. dr JELENA RADIĆ-PERIĆ

Recenzenti:
Prof. dr Ankica JOVANOVIĆ
Prof. dr Milorad JEREMIĆ

Za izdavače:
Prof. dr Vera DONDUR
Lazar RAĐENOVIĆ

Zamenik glavnog i odgovornog urednika
Zoran ŽIVKOVIĆ

Urednik izdanja
Gorana PERIĆ

Izdavači:
JP Službeni list SCG, Beograd, Jovana Ristića 1
Fakultet za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu, Beograd, Studentski trg 12 – 16

PREDGOVOR DRUGOM IZDANJU

Početkom 19. veka Atomistika je označavala naučni pravac koji je podržavao mišljenje da je materija sastavljena od atoma i molekula, a atomistima su nazivani hrabri pobornici ove ideje. Kako su se tokom vremena broj i uverljivost dokaza o atomskoj prirodi materije uvećavali, tako je rastao i uticaj Atomistike, pa je još krajem prve decenije 20. veka postalo jasno to da Atomistika nije jedan nego jedini pravac za suštinsko razumevanje strukture materije. Dakle, danas smo svi mi atomisti.

Za prihvatanje ideje da je svet oko nas sazdan od atoma i molekula više nije potrebna posebna hrabrost niti tvrda vera, već samo dobra škola. Struktura materije na atomskom nivou izučava se u savremenom svetu na svim nivoima obrazovanja od osnovne škole do poslediplomskih studija.

Poznavanje atomske prirode materije potrebno je brojnim profesijama – od fizičara i hemičara, do farmaceuta i lekara. Zato se Atomistika širom sveta izučava na brojnim studijskim grupama pod izvornim nazivom ili kao Moderna fizika.

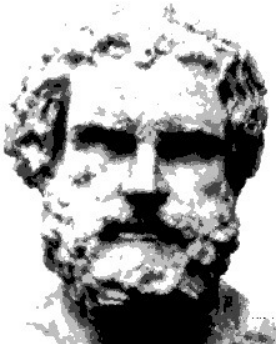
Ovaj udžbenik namenjen je studentima Fakulteta za fizičku hemiju, a koristiće i studentima drugih studijskih grupa koji žele ili im je potrebno da se detaljnije upoznaju sa strukturom materije na atomskom nivou. Obuhvaćeni materijal, i nivo izlaganja, u velikoj meri se podudaraju sa kursevima Moderne fizike.

U ovom, drugom izdanju, potpuno je sačuvan format prethodnog. To se pre svega odnosi na Digresije (u ovom izdanju koristimo termin „Dodatak"). Namera autora je bila da omoguće čitaocu da Atomistiku nauči, bez potrebe da proučava dodatnu literaturu. Dakle, uloga Digresije je više da podseti čitaoca na sve što bi već trebalo da zna iz matematike, fizike i fizičke hemije, nego da ga podučava tome. Čitalac upućeniji u materiju koju izlažemo može da preskoči Digresije, a onaj kome se učini da je izlaganje na previše visokom nivou, treba da im posveti više pažnje. Većina poglavlja je prerađena, upotpunjena zadacima sa rešenjima, a dodato je i novo poglavlje o elementarnim česticama. Prilog je dopunjen tabelama neophodnim za rešavanje zadataka, a prikazane su i kratke biografije čuvenih naučnika.

Autori toplo zahvaljuju dr Branislavu Simonoviću na savetima i korisnim sugestijama u vezi sa stručnom terminologijom, a naročito na strpljenju u čitanju brojnih verzija rukopisa. Takođe zahvaljuju Dragomiru Ćurkoviću, na računarskoj obradi brojnih crteža. Zahvalnost dugujemo, i recenzentima *Atomistike*, profesorima Ankici Jovanović i Miloradu Jeremiću.

Posebnu zahvalnost izražavamo izdavaču ove knjige Javnom preduzeću Službeni list Srbije i Crne Gore i njegovim saradnicima, a naročito uredniku izdanja i lektoru Gorani Perić.

Autori



„Svemir je, u stvarnosti, izgrađen samo od atoma i praznine između njih; sve ostalo je plod mašte. Postoje bezbrojni svetovi i svaki ima svoj početak i svoj kraj u vremenu. I nikada nije nešto nastalo ni iz čega, niti je uništeno i svedeno na ništa. I atomi su nepojmljivi u veličini i količini, krećući se u svim pravcima u praznom prostoru sudarajući se i stvarajući čvorove iz kojih nastaju sve složene supstance: vatra, voda, vazduh i zemlja. Činjenica je da su sve supstance samo kombinacija izvesnih atoma. Zahvaljujući svojoj tvrdoći, atomi su neuništivi i nepromenljivi."

Demokrit (460–370 p.n.e.)

„Ako bi u kakvoj katastrofi, celokupno naučno znanje bilo uništeno, i ako bi samo jedna rečenica mogla da se prenese sledećim generacijama, koja bi to najznačajnija misao bila koja bi mogla da se izrazi sa najmanje reči? Verujem da je to atomska hipoteza (ili atomska teorija, zovite je kako želite) da su sve stvari napravljene od atoma – sićušnih čestica koje su u neprekidnom kretanju, privlačeći jedna drugu kada su malo razmaknute, ali odbijajući se kada se stisnu jedna uz drugu.

U toj rečenici, videćete, sadržano je ogromno znanje o svetu, samo ako se upotrebi malo mašte i razmišljanja."

Ričard Filips Fejnman (1918–1988)

1. ATOMISTIKA I ATOMISTIČKI POGLED NA STRUKTURU MATERIJE

„VERUJEM U ATOME
U svakoj mojoj veri ima
nevernog Tome
kolebljivosti muka,
jedino tvrdo verujem u
neverovatnu
religiju nauka,
u bogove naučne vasione,
elektrone, protone, neutrone,...”

Desanka Maksimović

1.1 UVOD

Dugo se smatralo da je materija kontinualne (neprekidne) prirode, što potiče još od Anaksagore (oko 500–428 p.n.e.). Drukčiji pogled, da je priroda materije diskretna (diskontinualna), izneo je Demokrit (oko 460–370 p.n.e.), koji je najmanje sastojke materije nazvao atomima (atomos – grčki nedeljiv). Prema prvom shvatanju objekt može da se deli na delove bezgranično; prema drugom, deljenje je nemoguće kada se dostignu dimenzije atoma.

Iako je bila živa, diskusija među grčkim filozofima ostala je bez rezultata jer ni za jedno gledište nije bilo eksperimentalne, iskustvene, potvrde. Rastuća sumnja geometričara da je prostor neprekidan dala je težinu teoriji o neprekidnoj građi materije. Međutim, ni tada, ideje o diskretnoj, čestičnoj strukturi materije nisu u potpunosti bile odbačene. One su dobile jasnu podršku Lukrecija (97–55 p.n.e.) u poznatom delu *O prirodi stvari* i mnogih poslerenesansnih naučnika, uključujući Isaka Njutna (Isaac Newton, 1642–1727) i Ruđera Boškovića (1711–1787). Međutim, prve eksperimentalne dokaze o ispravnosti takvog shvatanja pružili su tek hemičari oko 1800. godine.

U 18. veku nekolicina hemičara bavila se ispitivanjem osobina gasova i bili su poznati pod imenom „pneumatski hemičari”. Između ostalih, to su bili Džozef Blek (Joseph Black, 1728–1799), Džozef Pristli (Joseph Pristley, 1733–1804), Henri Kevendiš (Henry Cavendish, 1731–1810), Džon Dalton (John Dalton, 1766–1844),

Karl Šele (Karl Wilhem Scheele, 1742–1786) i Antoan Lavoazije (Antoine Laurent Lavoisier, 1743–1794). Savremena teorija o atomskoj strukturi materije nastala je iz istraživanja ovih hemičara.

Nešto posle 1850. godine, interes za osobine gasova i njihovo istraživanje pokazali su i fizičari, što je dovelo do kinetičke teorije gasova koju su utemeljili Džems Klerk Maksvel (James Clerk Maxwell, 1831–1879) i Ludvig Bolcman (Ludwig Boltzmann, 1844–1906). U toj teoriji, koja i danas važi, pretpostavlja se da se gasovi sastoje od malih čestica, atoma ili molekula, koje se nalaze u stanju neprekidnog, haotičnog ketanja.

Atomistički pogled prevladao je tek posle dugotrajne borbe sa „energetičarima", kako su nazivani protivnici atomske hipoteze. Uprkos mnogim dokazima o postojanju atoma mnogi su atomistiku smatrali *„interesantnom hipotezom, dopustivom sa stanovišta naše spoznajne moći"*. Odbijanje atomske hipoteze od filozofa 19. veka ostavilo je traga i na naučnike toga doba. Na primer, Šopenhauer (Arthur Schopenhauer, 1788–1860), nemački filozof, atome je smatrao ničim drugim do *„izmišljotinom apotekara neznalica"*, dok je Mah (Ernst Mach, 1838–1916), austrijski filozof i fizičar, „atomističare" nazivao „udruženjem vernika", misleći na nedostatak očiglednog dokaza o postojanju atoma. Mah je svakome ko bi mu se obratio braneći atomističku hipotezu odgovarao pitanjem: *„Da li ste ikada lično videli atom?"* Međutim, kada je 1910. godine video scintilacije alfa-čestica na fluorescentnom zaklonu, priznao je, sa rezervom, da najzad veruje u postojanje atoma.

Slično Mahu i najtvrdokorniji protivnici atomske hipoteze, pritisnuti novim dokazima, polako su prihvatali stvarnost postojanja atoma. To se desilo na prelazu iz 19. u 20. vek, mnogo pre isteka 300 godina koliko je u očaju predskazao Bolcman, koji je na kraju, neshvaćen od svojih savremenika, sam sebi prekratio život. Igrom sudbine, samo nekoliko godina kasnije, njegove ideje postale su opšteprihvaćene i neizmenjene do današnjih dana.

Tako je ideja o čestičnoj prirodi materije postala opšteprihvaćena, iako se o samim atomima veoma malo znalo. Zbog toga je glavna briga fizičara skraja 19. veka bila utvrđivanje unutrašnje strukture atoma. Istorijski gledano, istraživanja su se odvijala u tri paralelna pravca, koja je godine 1913. ujedinio Nils Bor (Niels Bohr, 1885–1962) u vidu čuvenih postulata i modela atoma.

Prva grupa, u kojoj se isticao J. J. Tomson (Joseph John Thomson, 1856–1940), ispitivala je električno pražnjenje u gasovima. Godine 1897. Tomson je pokazao da se katodni zraci sastoje od malih negativno naelektrisanih čestica – **elektrona.** To je prvi sastojak atoma koji je bio ustanovljen. Prisustvo elektrona opaženo je kasnije i u nekim drugim pojavama kao što su termojonska emisija, fotoelektrični efekt, x – zračenje i radioaktivnost.

Oko godine 1910. Tomson je ispitivao slabe pozitivne zrake i pokazao da se sastoje od pozitivnih čestica čija masa daleko prevazilazi masu elektrona. On je pravilno zaključio da te čestice predstavljaju ostatak atoma posle odlaska elektrona sa njega.

Pre Tomsona atom je zamišljan kao mala bilijarska kugla. Tomson je ne samo odredio apsolutnu masu te kugle, već je ustanovio da male, negativno naelektrisane čestice mogu da se odvoje od nje, ostavljajući joj pozitivno naeleketrisanje. Na osnovu toga Tomson je predložio „plum puding" (puding od šljiva) model atoma. Bez obzira na brojne slabosti, Tomsonov model imao je ogroman značaj jer je prvi put ukazano na postojanje unutrašnje strukture atoma.

Druga značajna grupa istraživača bavila se pojavom prirodne radioaktivnosti koju je otkrio 1896. godine Anri Bekerel (Henri Becquerel, 1852–1908). Ključnu ulogu u ovoj grupi odigrao je Raderford (Ernest Rutherford, 1871–1937), mada treba da se naglasi da su Pjer i Marija Kiri (Pierre Curie, 1859–1906 i Marie Curie, 1867–1934), bili istaknuti članovi grupe i u najvećoj meri zaslužni su za razvoj metoda za ekstrahovanje i koncentrovanje prirodno radioaktivnog materijala. (A. Bekerel i Marija i Pjer Kiri su 1903. godine dobili Nobelovu nagradu za fiziku. Sama Marija Kiri 1911. ponovo je dobila Nobelovu nagradu, ovoga puta za hemiju.)

Radioaktivnost predstavlja raspad atoma. Za vreme raspada emituju se tri vrste zračenja: alfa, beta i gama. Raderford je prvi utvrdio razliku između njih i ispitao njihove osobine. Pokazao je da alfa-zrake sačinjava mlaz pozitivno naelektrisanih čestica, čijim je rasejavanjem na tankim zlatnim folijama postavio nuklearni model atoma, 1911. godine.

Treća grupa istraživača, u kojoj je vodeću ulogu imao Maks Plank (Max Planck, 1858–1947), ispitivala je zakone zračenja crnog tela. Najvažnije otkriće te grupe jeste da se emisija zračenja odvija u kvantima, tj. u porcijama, a ne neprekidno, kao što je to predviđala klasična teorijska fizika.

Godine 1913, na scenu je stupio Nils Bor, koji je, objedinivši rezultate sva tri pravca istraživanja, predložio model atoma kojim je postavio temelje današnjeg shvatanja strukture atoma. Od prve grupe usvojio je činjenicu o postojanju i osobinama elektrona, od druge nuklearnu strukturu atoma, a od treće činjenicu da atom emituje svetlost u kvantima, a ne neprekidno.

Primeri

Primer 1.1.1 Legenda kaže da je Demokrit došao do atomističke predstave o strukturi materije pitajući se da li sekući jabuku može to da čini do u beskonačnost ili će da dođe do delića jabuke koji dalje ne može da preseče. Zaključio da će u tom procesu posle konačnog broja presecanja jabuke doći do delića koji je nevidljiv – do atoma.

Ako se zna da su dimenzije atoma reda veličine 10^{-8} cm, onda može da se izračuna koliko puta bi Demokrit trebalo da preseče jabuku (da je bio sklon eksperimentu) da bi došao do atoma, ako je njegova jabuka imala prečnik od 10 cm.

REŠENJE:

U svakom deljenju, zapremina preostalog komada jabuke smanjuje se na polovinu prethodne vrednosti. Posle n deljenja zapremina iznosi:

$$V_n = \frac{V_o}{2^n}$$

gde je V_o zapremina cele jabuke. Odavde sledi:

$$\log V_n = \log V_o - n \log 2$$

$$n = \frac{\log V_o - \log V_n}{\log 2}.$$

Zamenom $V_o = 10^3$ cm^3, $V_n = (10^{-8})^3$ cm^3 i log 2 = 0,30 nalazimo:

$$n = \frac{3 + 24}{0,\ 3} = 90.$$

Prema tome, Demokrit bi došao do atoma deleći jabuku na polovine samo devedeset puta!

Primer 1.1.2 Prvi pokušaj da se eksperimentalno odredi poluprečnik atoma pripisuje se Lomonosovu (1711–1765). On je 1742. godine, posmatrajući zlatare kako vešto kuju listiće od zlata, zaključio da prečnik atoma zlata mora da bude manji od debljine najtanjeg zlatnog listića koji je u stanju da iskuje najspretniji majstor.

Odrediti prečnik atoma zlata do kojeg je došao Lomonosov ako je zlatar u stanju da od zrnca zlata mase 100 mg iskuje listiće površine približno 50 cm^2. Gustina zlata je 19300 kg/m^3 (19,3 g/cm^3).

REŠENJE:

Debljina listića r iz koje se dobija procena o najvećem mogućem prečniku atoma, može da se izračuna na osnovu njegove površine P i zapremine V:

$$r = \frac{V}{P}$$

a zapremina iz mase m i gustine d:

$$V = \frac{m}{d}.$$

Tada je:

$$r = \frac{m}{Pd}$$

odakle se uvrštavanjem odgovarajućih brojčanih vrednosti m = 0,1 g, P = 50 cm^2 i d = 19,3 g/cm^3 dobija:

$$r = 10^{-6} \text{ m}.$$

Tako je Lomonosov procenio da atom zlata ne može da bude veći od desetohiljaditog dela santimetra.

Primer 1.1.3 Bendžamin Franklin (1706–1790), godine 1773. pokušao je eksperimentalno da odredi dimenzije atoma (molekula). On je zabeležio da se kafena kašičica ulja (zapremine ≈ 4 cm^3) kad se sipa na površinu mirnog jezera, razastire po površini od 0,2 Ha (2000 m^2). Izračunati prečnik molekula ulja na osnovu Franklinovog ogleda.

REŠENJE:

Problem je isti kao i prethodni. Za gustinu ulja može da se uzme da je 1 g/cm^3:

$$r = \frac{V}{Pd} = \frac{4}{2000 \times 10^4} = 2 \times 10^{-7}\text{cm} = 200 \text{ nm}.$$

Franklin je dobio da su dimenzije atoma i molekula reda veličine 100 nm (1000 Å).

Primer 1.1.4 Godine 1858. J. J. Waterston je predložio metodu za određivanje dimenzija molekula na osnovu makroskopskih osobina tečnosti. On je pošao od toga da tečnost, u prvoj aproksimaciji, može da se zamisli kao kubični raspored molekula koji se međusobno dodiruju. Pri tome, u pravcu svake od glavnih osa postoji n molekula po jedinici dužine odnosno n^3 molekula po jedinici zapremine. Svaki molekul u unutrašnjosti tečnosti stvara vezu sa šest svojih suseda, pri čemu je energija za kidanje jedne takve veze ε. Znači, za isparavanje jedinice zapremine tečnosti potrebno je da se raskine $6n^3$ veza odnosno da se utroši energija $6n^3\,\varepsilon$. Ova energija, u stvari, predstavlja energiju isparavanja jedinične zapremine tečnosti, tj. latentnu toplotu isparavanja, L.

Za razliku od molekula u unutrašnjosti tečnosti, molekul u površinskom sloju obrazuje samo pet veza – četiri sa susedima koji se nalaze u površinskom sloju i petu sa najbližim molekulom iz susednog sloja. Zbog toga, za izvlačenje molekula iz unutrašnjosti na površinu treba da se raskine jedna veza čija je energija ε. Pošto površinu tečnosti jediničnih dimenzija obrazuje n^2 molekula, to je za njeno stvaranje potrebno da se utroši energija $n^2\,\varepsilon$ koja može da se poistoveti sa površinskim naponom, S.

Latentna toplota isparavanja vode je 2×10^{10} erg/cm^3 (1 erg = 10^{-7} J), a površinski napon 75 erg/cm^2. Izračunati prečnik molekula vode po Waterstonovoj metodi.

REŠENJE:

$L = 6n^3\varepsilon$ $\quad$ n – broj molekula po 1 cm
$S = n^2\varepsilon$ $\quad$ $1/n$ – broj cm po molekulu, tj. prečnik molekula

$$\frac{L}{S} = 6n,\ \frac{1}{n} = \frac{6S}{L}.$$

Za $S = 75$ erg/cm^2 i $L = 2 \times 10^{10}$ erg/cm^3,

$$\frac{1}{n} \approx 2\times10^{-10}\text{m}.$$

1.2 POTVRDA ATOMISTIČKE HIPOTEZE

DODATAK 1.2

D-1.2.1 Njutnovi zakoni

I Njutnov zakon: Telo na koje ne deluje sila nalazi se u stanju mirovanja ili ravnomernog pravolinijskog kretanja. Isto važi i kada na telo deluje više sila koje su u ravnoteži:

$$\sum_i \vec{F} = 0. \qquad \text{(D-1.2.1)}$$

II Njutnov zakon: Ubrzanje $\vec{a}$ koje sila $\vec{F}$ saopštava telu mase m proporcionalno je sili, a obrnuto proporcionalno masi tela:

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m}.$$

Otuda je:

$$\vec{F} = m\vec{a}. \qquad \text{(D-1.2.2)}$$

D-1.2.2 Stoksov zakon

Sila trenja koja deluje na sferu poluprečnika *a,* koja brzinom $\vec{\upsilon}$ pada kroz fluid čiji je koeficijent viskoznosti η (eta), iznosi:

$$\vec{F}_{tr} = -6\pi\eta a\vec{\upsilon}. \qquad \text{(D-1.2.3)}$$

Negativni predznak pokazuje da sila trenja uvek deluje u suprotnom smeru od smera kretanja. U skalarnom obliku:

$$F_{tr} = 6\pi\eta a\upsilon. \qquad \text{(D-1.2.4)}$$

D-1.2.3 Zakon gravitacije

Telu mase m_t sila Zemljine teže saopštava ubrzanje $\vec{g}$:

$$\vec{F}_g = m_t\vec{g}. \qquad \text{(D-1.2.5)}$$

D-1.2.4 Arhimedov zakon

Na svako telo potopljeno u fluid deluje sila potiska koja je jednaka težini telom istisnutog fluida:

$$\vec{F}_p = -m_f\vec{g}. \qquad \text{(D-1.2.6)}$$

Tada je efektivna sila gravitacije (prividna težina tela) jednaka vektorskom zbiru gravitacione sile i sile potiska:

$$\vec{F}_{g,eff} = \vec{F}_g + \vec{F}_p = (m_t - m_f)\vec{g}. \qquad \text{(D-1.2.7)}$$

Pošto je zapremina tečnosti potisnute telom jednaka zapremini tela V_t zgodno je da se mase tela i fluida izraze preko njihovih gustina. Ako je gustina tela ρ_t, tada je $m_t = \rho_t V_t$. Slično je i za fluid $m_f = \rho_f V_t$, gde je ρ_f gustina fluida. Tada iz jednačine (D-1.2.7) nalazimo da je efektivna sila gravitacije za telo potopljeno u fluid:

$$\vec{F}_{g,eff} = (\rho_t - \rho_f)V_t\vec{g}. \qquad \text{(D-1.2.8)}$$

Izraz (D-1.2.8) posebno je pogodan zbog toga što pokazuje zavisnost efektivne sile od gustine tela i fluida. Ako je gustina fluida veća od gustine tela, tada je izraz u zagradi negativan i efektivna sila deluje u suprotnom smeru od smera gravitacije. Na tom principu radi podmornica, vazdušna lađa (cepelin, dirižabl), aerostat (balon) itd.

D-1.2.5 Gradijent

Skalarna veličina U koja u svakoj tački prostora M ima određenu vrednost naziva se skalarnom funkcijom tačke ili skalarnim poljem, $U = U(M)$. Skalarno polje je, na primer, polje temperature, koncentracije, potencijala, gustine, itd. Ako se tačka M odredi njenim koordinatama (x, y, z), skalarno polje može da se izrazi kao funkcija tri promenljive $U = U(x, y, z)$. Tačke u kojima funkcija ima stalne vrednosti, $U = const.$, obrazuju u prostoru *površinu jednačine*. Za različite vrednosti konstante, $const. = U_0, U_1, U_2, \ldots$ dobijaju se različite površine. Kroz svaku tačku polja prolazi jedna takva površina, osim kroz tačke u kojima funkcija nije jednoznačno određena.

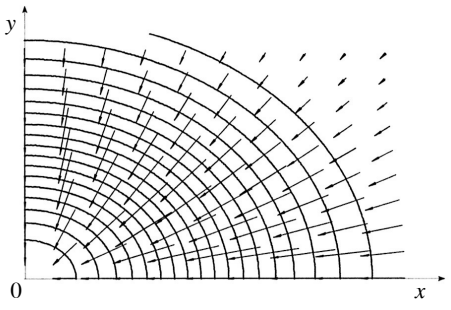
Gradijent polja U [označava se ∇U (∇ – nabla ili Hamiltonov operator) ili grad U] je vektor određen u svakoj tački polja. Njegov pravac je normalan na površinu jednačine, smer mu je ka rastućim vrednostima funkcije U, a intenzitet mu je $\partial U / \partial \vec{n}$, gde je $\vec{n}$ jedinični vekor (ort) normale. U Dekartovom koordinatnom sistemu:

$$\text{grad } U(x,y,z) = \nabla U(x,y,z) = \frac{\partial U}{\partial x}\,\vec{i} + \frac{\partial U}{\partial y}\,\vec{j} + \frac{\partial U}{\partial z}\vec{k}\,. \qquad \text{(D-1.2.9)}$$

Ako se polje menja samo u dve dimenzije, $U = U(x,y,z = const.) = U(x,y)$, onda je dovoljno da se posmatra samo jedan presek. Tada se površine jednačine svode na linije jednačine $U(x,y) = const.$, a gradijent na:

$$\text{grad } U(x,y,) = \nabla U(x,y,) = \frac{\partial U}{\partial x}\,\vec{i} + \frac{\partial U}{\partial y}\,\vec{j}. \qquad \text{(D-1.2.10)}$$

Na Slici D-1.2.1 prikazano je skalarno polje $U = \exp(-ax^2 - by^2)$ i njegov gradijent. Treba da se uoči da su vektori gradijenta normalni na linije za koje je $U = const.$



Slika D-1.2.1 Skalarno polje i njegov gradijent. Gradijent polja se predstavlja vektorima koji za svaku tačku imaju intenzitet i smer prema jednačini (D-1.2.10).

Iz jednačine (D-1.2.10) sledi da je za jednodimenziono polje intenzitet gradijenta jednak izvodu funkcije polja, a smer je ka rastućim vrednostima funkcije:

$$\text{grad } U(x) = \nabla U(x) = \frac{dU}{dx}\,\vec{i}\,. \qquad \text{(D-1.2.11)}$$

Za rastuću funkciju gradijent je pozitivan, a za opadajuću negativan.

D-1.2.6 Osmotski pritisak

Kada se rastvor polupropustljivom membranom (membrana koja propušta samo molekule rastvarača, a ne i rastvorka) odvoji od rastvarača, tada rastvarač kroz membranu prolazi

u rastvor. Ta pojava naziva se osmoza, a najvažniji primer predstavlja prenošenje vode kroz ćelijske membrane. Dakle, osmoza je prolaz rastvarača kroz polupropustljivu membranu pod uticajem koncentracionog gradijenta.

Osmotski pritisak Π je pritisak koji treba da se primeni na rastvor da bi se zaustavio osmotski priliv rastvarača. U razblaženim rastvorima osmotski pritisak opisuje se Van Hofovom jednačinom:

$$\Pi V = nRT \tag{D-1.2.12}$$

gde je V zapremina rastvora, n broj molova rastvorka, R gasna konstanta i T apsolutna temperatura. Zamenom molarne koncentracije c, prema očiglednoj vezi $c = n/V$, iz navedene jednačine sledi:

$$\Pi = cRT. \tag{D-1.2.13}$$

Van Hofova jednačina važi samo za vrlo razblažene rastvore kod kojih može da se očekuje da je rastvor idealan.

D-1.2.7 Translaciona difuzija

Kod osmoze, pod uticajem koncentracionog gradijenta, dolazi samo do prolaska rastvarača pošto membrana ne propušta molekule rastvorka. Ako se membrana kojom je rastvor bio razdvojen od rastvarača ukloni, tada će pod uticajem koncentracionog gradijenta i rastvorak da prolazi u rastvarač. Ovaj proces, kretanje rastvorka pod uticajem koncentracionog gradijenta, naziva se difuzija. Difuzija u stalnom koncentracionom gradijentu $\partial c/\partial x$, opisuje se I Fikovim zakonom. Fik (Fick) je ovaj zakon izveo na osnovu sličnosti sa provođenjem toplote:

$$J_c = -D\frac{\partial c}{\partial x}. \tag{D-1.2.14}$$

Veličina J_c se naziva fluks (ili tačnije, difuzioni fluks) i predstavlja količinu rastvorka prenetu u jedinici vremena kroz jedinicu površine i ima dimenzije $ML^{-2}T^{-1}$; D je difuzioni koeficijent, c koncentracija i x prostorna koordinata duž koje se posmatra prenošenje rastvorka. Koncentracioni gradijent predstavlja promenu koncentracije po jedinici dužine, i ima dimenzije ML^{-4}. Kao i kod koncentracije, količina rastvorka kod fluksa može da se izrazi na različite načine (preko broja molova, broja molekula, u gramima, itd.). Indeks c kod fluksa označava da količina rastvorka treba da se izrazi u istim jedinicama kao i koncentracija. Tada je koeficijent difuzije nezavisan od načina na koji se koncentracija izražava i ima dimenzije L^2T^{-1}, a izražava se u $m^2\ s^{-1}$ ili $cm^2\ s^{-1}$. Difuzija se odvija u suprotnom smeru od smera koncentracionog gradijenta, pa otuda negativni predznak u izrazu (D-1.2.14).

D-1.2.8 Nalaženje srednje vrednosti

Ako se za neku veličinu a u n eksperimenata ponovljenih pod istim uslovima nađe niz vrednosti $a_1, a_2, \ldots a_i, \ldots a_n$, tada se srednja vrednost dobija kao aritmetička sredina pojedinačnih vrednosti:

$$a_{sr} = \langle a \rangle = \frac{a_1 + a_2 + \ldots + a_1 + \ldots + a_n}{n} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} a_i. \tag{D-1.2.15}$$

Jednačina (D-1.2.15) podrazumeva da je veličina a stalna i da do razlika kod pojedinačnih vrednosti a_i dolazi zbog slučajnih odstupanja pri ponavljanju merenja. Odstupanja su

slučajna ako su nepredvidiva po veličini i po znaku, tj. ako rezultat jednog merenja ne zavisi od prethodnih merenja niti od merenja koja će uslediti. Iz odstupanja pojedinačnih merenja od srednje vrednosti $\langle a\rangle - a_i$, ne možemo da saznamo mnogo jer iz (D-1.2.15) neposredno sledi da je:

$$\delta = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\langle a\rangle - a_i) = 0. \qquad \text{(D-1.2.16)}$$

Očigledan, sledeći korak je da se umesto razlika $\langle a\rangle - a_i$, uzmu njihove apsolutne vrednosti, dakle:

$$|\delta| = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|\langle a\rangle - a_i|. \qquad \text{(D-1.2.17)}$$

Izraz (D-1.2.17) u principu nije loš, bar je različit od nule, ali ima ozbiljan nedostatak što podrazumeva da se uticaji pojedinačnih odstupanja uvek dodaju, tj., podrazumeva to da su sva odstupanja istog znaka. Dakle, u jednačini (D-1.2.16) sva odstupanja se međusobno potiru (što je neposredna posledica načina na koji je određena srednja vrednost), dok se u (D-1.2.17) sabiraju. Drugim rečima, ako odstupanja odredimo kao vektore, onda su u jednačini (D-1.2.16) vektori usmereni u suprotnim smerovima duž jedne ose tako da je njihova rezultanta jednaka nuli. U drugom slučaju, jednačina (D-1.2.17), svi vektori su paralelni i rezultanta je pozitivna (veća od nule). Ako su odstupanja zaista statistička, onda između njih ne sme da postoji veza, tj. vektori ne smeju ni da se stalno sabiraju niti da se potiru. Pravo rešenje između ove dve krajnosti (sabiranje ili oduzimanje vektora), je da se vektori smatraju ortogonalnim (međusobno normalnim), tj., da se vektorima dopusti da deluju u n uzajamno normalnih pravaca. Par normalnih vektora predstavlja sredinu između paralelnih vektora (koji se sabiraju) i antiparalelnih vektora (koji se međusobno oduzimaju). Za par normalnih vektora rezultanta se nalazi po Pitagorinoj teoremi, a za n vektora njenim uopštavanjem na n dimenzija:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\langle a\rangle - a_i)^2}. \qquad \text{(D-1.2.18)}$$

U teoriji grešaka izraz (D-1.2.18) naziva se standardna devijacija pojedinačnog određivanja i predstavlja veličinu kojom se opisuje kvalitet pojedinačnog merenja veličine *a.*

Na sličan način, za opisivanje molekulskih procesa koji su posledica ogromnog broja slučajnih događaja, vrednosti dobijene po ugledu na jednačine (D-1.2.16) ili (D-1.2.17) u sebi sadrže povezanosti (dakle predrasude) koje stvarno ne postoje. Za slučajne procese najispravnije je da se i srednja vrednost traži po ugledu na izraz (D-1.2.18) i ona se naziva srednja kvadratna vrednost. Dakle, za veličinu s koja se slučajno menja, srednja kvadratna vrednost se određuje kao:

$$\langle s^2\rangle = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}s_i^2. \qquad \text{(D-1.2.19)}$$

Pošto je obično sama veličina s značajna, a ne njen kvadrat, tada se koristi koren srednje kvadratne vrednosti kao parametar koji najbolje odražava datu veličinu posmatranog slučajnog procesa:

$$\sqrt{\langle s^2 \rangle} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} s_i^2} \ . \qquad \text{(D-1.2.20)}$$

Konačnoj pobedi atomistike značajan doprinos dali su Ajnštajn (Albert Einstein, 1879–1955) i Peren (Jean Baptiste Perrin, 1870–1942), francuski fizičar. Ajnštajn je 1905. godine, nezavisno od Smoluhovskog (Marian Smoluchowski, 1872–1917, poljski fizičar), matematički opisao Braunovo kretanje, a Peren je u seriji sjajnih ogleda tu teoriju eksperimentalno potvrdio 1909. godine.

Godine 1827. Robert Braun (Robert Brown, 1773–1858), škotski botaničar, opazio je da se čestice polenovog praha, suspendovane u vodi, haotično kreću pod uticajem nekih nepoznatih sila. To svoje zapažanje odmah je objavio u radu pod naslovom *Kratak prikaz mikroskopskih opažanja učinjenih u mesecima junu, julu i avgustu 1827. godine o česticama koje se nalaze u polenu biljaka i o opštem postojanju aktivnih molekula u organskim i neorganskim telima*. Braun je utvrdio da je uzročnik kretanja *„životna sila"* koju poseduju svi organski molekuli.

Mnogi naučnici proučavali su, sa manje ili više uspeha, Braunovo kretanje pre Ajnštajna. Bilo je mišljenja da je Braunovo kretanje izazvano neravnomernim zagrevanjem uzorka upadnom svetlošću, delovanjem električnih sila, itd. Zatim je usledio niz nalaza da Braunovo kretanje nije izazvano oscilacijama temperature, isparavanjem ili silama kojima čestice deluju jedna na drugu. Isto tako, utvrđeno je da se kretanje odvija bez promena tokom cele godine (u uzorku zapečaćenom između dve mikroskopske pločice), da se ubrzava sa porastom temperature i opadanjem dimenzija čestica. Godine 1877. prvi put je izražena, i danas prihvaćena ideja, da je Braunovo kretanje posledica sudara molekula tečnosti sa suspendovanim česticama.[1]

1.2.1 Elementarna teorija Braunovog kretanja

U nizu radova u periodu od 1902. do 1907. godine, Ajnštajn je izložio strogu teoriju Braunovog kretanja, služeći se dokazima klasične termodinamike i kinetičke teorije. Ovde ćemo da razmotrimo osnovnu teoriju u kojoj je Ajnštajn na pojednostavljen način izložio najvažnije rezultate. Bio je podstaknut, po sopstvenim rečima, uverenjem *„da bi elementarna teorija Braunovog kretanja bila svesrdno prihvaćena od strane brojnih hemičara"*.

Ajnštajn je pokazao da sve jednačine izvedene za razblažene rastvore neelektrolita, koji su mogli da se smatraju kontinuumom, važe i za suspenzije kod kojih diskretne čestice mogu da se vide pod mikroskopom. Utvrdio je, takođe, da osobine suspenzija zavise samo od viskoznosti rastvora, broja i prečnika čestica. Prvo je pokazao čestično poreklo osmotskog pritiska, zatim je povezao osmotski pritisak sa brzinom difuzije suspendovanih čestica i na kraju je difuziju uspeo da izrazi preko haotičnog kretanja čestica u polju sile osmotskog pritiska. Na osnovu dobijenih jed-

[1] Postoje shvatanja da Braun, sa tehničkim mogućnostima kojima je raspolagao, zapravo i nije mogao da opazi sudare suspendovanih čestica sa molekulima rastvarača već mešanje tečnosti pod uticajem gradijenta temperature.

načina, Ajnštajn je uspeo da poveže makroskopski merljive veličine dimenzije i broj čestica, njihov osmotski pritisak i koeficijent difuzije, sa Avogadrovim brojem, ključnim parametrom atomističke hipoteze.

Osmotski pritisak

Ajnštajn je pokazao da izraz za osmotski pritisak pravog rastvora neelektrolita p u zavisnosti od koncentracije c (u molovima po jedinici zapremine):

(D-1.2.13) $$p = cRT \tag{1.2.1}$$

može neposredno da se primeni za izračunavanje osmotskog pritiska u suspenzijama gde se koncentracija suspendovanih čestica v izražava kao broj čestica po jedinici zapremine:

$$p = v\frac{RT}{N}. \tag{1.2.2}$$

Ovde je R gasna konstanta, T temperatura i N Avogadrov broj. Mada iz jednačine (1.2.1) u jednačinu (1.2.2) može da se pređe preko jednostavne veze između molske koncentracije c (broj molova u jedinici zapremine) i koncentracije čestica v (broj čestica u jedinici zapremine):

$$c = \frac{v}{N} \tag{1.2.3}$$

jednakost izraza (1.2.1) i (1.2.2) ima mnogo dublji smisao. Valjanost istih izraza za prave rastvore (gde je termodinamičko objašnjenje osmotskog pritiska moguće i bez uvođenja pojma molekula) i za suspenzije (kod kojih čestice, uzročnici pritiska, mogu da se posmatraju pod mikroskopom) navodi da u pravim rastvorima osmotski pritisak potiče od prisustva molekula, dakle, od čestica koje su nevidljive pod mikroskopom. Drugim rečima, jednakost izraza (1.2.1) i (1.2.2) valjana je u onoj meri u kojoj i atomistička hipoteza. Ova jednakost mogla bi da se proveri merenjem osmotskog pritiska i koncentracije suspenzije.

Osmotski pritisak i difuzija

Difuzija je kretanje rastvorka pod uticajem gradijenta koncentracije. Količina rastvorka koja prođe u jedinici vremena kroz jediničnu površinu naziva se fluks J_c i proporcionalna je gradijentu koncentracije dc/dx:

(D-1.2.14) $$J_c = -D\frac{dc}{dx}. \tag{1.2.4a}$$

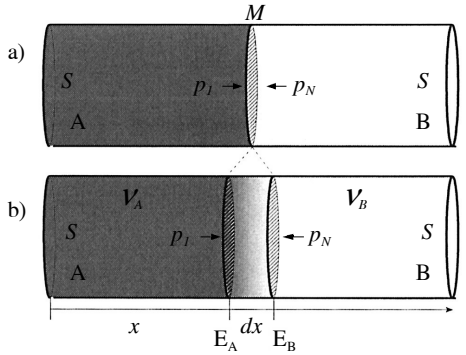
Negativni znak pokazuje to da se difuzija odvija u suprotnom smeru od smera gradijenta; indeks c označava da fluks treba da se izrazi u istim jedinicama kao i koncentracija, tako da koeficijent difuzije D (koji ima dimenzije L^2T^{-1}) ne zavisi od načina na koji se izražava koncentracija. Dakle, ako je koncentracija izražena u molovima po jedinici zapremine, tada je i fluks izražen u molovima po jedinici

površine u jedinici vremena. Na primer, množenjem izraza (1.2.4) Avogadrovim brojem N, molarna koncentracija se, po jednačini (1.2.3), prevodi u čestičnu $cN = v$, a molarni fluks J_c u čestični fluks J_v, $J_cN = J_v$, odakle sledi:

$$J_v = -D\frac{dv}{dx} \tag{1.2.4b}$$

pri čemu koeficijent difuzije D ostaje neizmenjen.

Ajnštajn je uspeo da poveže koeficijent difuzije, u osnovi makroskopsku veličinu, sa veličinom čestice rastvorka, tj. sa dimenzijom molekula, na sledeći način. Posmatrajmo cilindar poprečnog preseka S koji je ispunjen razblaženim rastvorom (ili suspenzijom) i pregrađen membranom M, Slika 1.2.1a. Membrana deli cilindar na dva dela A i B, pokretna je i propušta samo molekule rastvarača. Ako je koncentracija rastvora u delu A veća od koncentracije u delu B, tada za održavanje membrane u mestu treba da se primeni spoljašnja sila koja deluje iz smera niže koncentracije, $B \rightarrow A$. Dakle, da bi se očuvala ravnoteža, na membranu treba da se deluje spoljašnjom silom. Očigledno, sila treba da izjednači razliku u osmotskim pritiscima sa različitih strana membrane, p_A sleva i p_B zdesna. U odsustvu spoljašnje sile, membrana se kreće u smeru dela sa nižom koncentracijom, $A \rightarrow B$, dok se koncentracije u oba dela međusobno ne izjednače. Otuda sledi da je glavni pokretač izjednačavanja koncentracija difuzijom, sila koja potiče od osmotskog pritiska. Difuzija može da se zaustavi uravnotežavanjem ove sile spoljašnjom silom koja deluje na pokretnu membranu.



Slika 1.2.1 Uz pronalaženje veza između osmotskog pritiska i difuzije: a) pokretna polupropustljiva membrana, M, deli cilindar poprečnog preseka S na dva dela A i B u kojima rastvori imaju koncentracije, v_A i v_B redom. Na membranu deluju različiti osmotski pritisci iz smera dela A i dela B, označeni sa p_A i p_B, pa je potrebna spoljašnja sila $(p_A\text{-}p_B)S$ da membranu održi u mestu; b) ako se membrana ukloni, ista sila (osmotskog pritiska) pokreće rastvorak da difunduje.

Posmatrajmo sada difuziju u istom cilindru iz kojeg je membrana uklonjena. Prvo ćemo da ispitamo silu osmotskog pritiska koja u procesu difuzije deluje na rastvorenu supstancu u beskonačno tankom sloju, površine S i debljine dx. Sloj zapremine Sdx omeđen je beskonačno bliskim ravnima E_A i E_B, Slika 1.2.1b. Sila osmotskog pritiska koja deluje na presek E_A je p_AS, a na presek E_B iznosi p_BS. Rezultujuća sila osmotskog pritiska koja deluje na element zapremine Sdx je $(p_A\text{-}\, p_B)S$. Tada je rezultujuća sila po jedinici zapremine:

$$F = \frac{(p_A - p_B)S}{Sdx} = \frac{p_A - p_B}{dx}\,. \tag{1.2.5}$$

Gradijent sile osmotskog pritiska određujemo kao odnos porasta pritiska *dp* i beskonačno male promene koordinate *dx*:

(D-1.2.11)
$$\frac{dp}{dx} = \lim_{x_B \to x_A} \left(\frac{p_B - p_A}{x_B - x_A} \right)$$

ili za slučaj koji razmatramo, Slika 1.2.1:

$$\frac{dp}{dx} = \frac{p_B - p_A}{dx} = -\frac{p_A - p_B}{dx} \,. \tag{1.2.6}$$

Zamenom izraza (1.2.6) u (1.2.5), nalazimo da je sila osmotskog pritiska po jedinici zapremine, u beskonačno tankom elementu cilindra, jednaka gradijentu osmotskog pritiska:

$$F = -\frac{dp}{dx} \,. \tag{1.2.7}$$

Negativni znak pokazuje to da sila deluje u smeru opadajućeg gradijenta, dakle od veće ka manjoj koncentraciji.

Gradijent osmotskog pritiska *dp/dx* možemo neposredno da izračunamo diferenciranjem izraza (1.2.2):

$$\frac{dp}{dx} = \frac{RT}{N} \frac{dv}{dx} \tag{1.2.8}$$

što zamenom u (1.2.7) daje:

$$F = -\frac{RT}{N} \frac{dv}{dx} \,. \tag{1.2.9}$$

Sila *F* deluje na sve čestice rastvorka u jediničnoj zapremini, dakle, deluje na *v* čestica. Silu po jednoj čestici F_1 dobijamo deljenjem ukupne sile ukupnim brojem čestica *F/v*, odakle iz jednačine (1.2.9) nalazimo da je:

$$F_1 = -\frac{RT}{vN} \frac{dv}{dx} \,. \tag{1.2.10}$$

Sila F_1 pokreće česticu rastvorka u smeru suprotnom od smera koncentracionog gradijenta, dakle, čestica difunduje pod uticajem sile osmotskog pritiska od veće koncentracije ka manjoj.

Kretanju čestica suprotstavlja se sila trenja. Za sferne čestice koje su mnogo veće od molekula rastvarača, sila trenja može da se opiše klasičnom hidrodinamičkom, Stoksovom jednačinom:

(D-1.2.4)
$$F_{tr} = 6\pi a \eta \upsilon \tag{1.2.11}$$

gde je a poluprečnik čestice, η viskoznosti rastvarača, a υ brzina kretanja čestice. U ravnotežnim uslovima, kada se sila trenja izjednači sa pogonskom silom, čestica postiže graničnu brzinu υ_D. Dakle, u termodinamičkoj ravnoteži važi da je $F_1 = F_{tr}$, odakle iz jednačina (1.2.10) i (1.2.11) nalazimo:

$$\upsilon_D \nu = -\frac{RT}{N}\frac{1}{6\pi a\eta}\frac{d\nu}{dx}. \tag{1.2.12}$$

Ako uočimo da je proizvod granične brzine čestice υ_D i broja čestica po jedinici zapremine ν, jednak broju čestica koje u jedinici vremena prođu kroz jediničnu površinu, dakle jednak je fluksu čestica $\upsilon_D \nu = J_\nu$, onda nalazimo da je izraz (1.2.12) jednak sa difuzionom jednačinom (1.2.4b). Otuda sledi da su i koeficijenti proporcionalnosti međusobno jednaki, tj.:

$$D = \frac{RT}{N}\frac{1}{6\pi a\eta}. \tag{1.2.13}$$

Izraz (1.2.13), poznat i kao Stoks-Ajnštajnova jednačina, daje vezu između viskoznosti rastvarača η i koeficijenta difuzije rastvorka D i poluprečnika rastvorka a. Ono što je još važnije, Stoks-Ajnštajnova jednačina daje vezu između makroskopski merljivih veličina (koeficijent difuzije, visokoznost, temperatura) i mikroskopskih veličina, poluprečnika rastvorka i Avogadrovog broja:

$$aN = \frac{RT}{D}\frac{1}{6\pi\eta}. \tag{1.2.14}$$

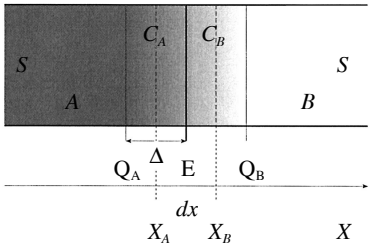
Ova jednačina pruža mogućnost da se eksperimentalno odredi Avogadrov broj (ako je poznat poluprečnik čestica, na primer, u suspenziji) ili prečnik molekula (ako se uzme vrednost za Avogadrov broj iz drugih merenja). Drugim rečima, Stoks-Ajnštajnova jednačina daje mogućnost da se atomistička hipoteza eksperimentalno potvrdi.

Difuzija kao posledica slučajnog kretanja molekula

Kinetička teorija daje još jedan način da se opiše proces difuzije. Zbog haotičnog kretanja molekula, koje može da se smatra toplotnim sadržajem supstance, molekuli tečnosti menjaju svoj položaj na nepredvidiv način. To dovodi do toga da se koncentracija rastvora, prvobitno neujednačena, vremenom izjednači po celoj zapremini rastvora.

Razmotrimo proces slučajnog kretanja, zbog jednostavnosti, samo u jednoj dimenziji, recimo duž pravca ose cilindra x-ose, Slika 1.2.2. Zamislimo da znamo x-koordinatu svake čestice u vremenu t i u vremenu $t + \tau$, gde je τ dovoljno kratak interval u kojem promena koncentracije usled difuzije može da se zanemari. U intervalu τ prvi molekul pomeri se duž x-ose za Δ_1, drugi za Δ_2, itd. Ovi pomaci Δ_1, Δ_2, ... nekada su pozitivni, a nekada negativni. Po apsolutnoj vrednosti različiti su za različite molekule. Pošto razmatramo razblažene rastvore, na kretanje molekula rastvorka ne utiču drugi molekuli rastvorka, već samo molekuli rastvarača. Otuda su

pomaci rastvorenih molekula nezavisni od koncentracije rastvora, sa jednakom verovatnoćom da budu pozitivni ili negativni duž pravca *x*-ose.



Slika 1.2.2 Uz vezu koeficijenta difuzije i putanje molekula. Posmatra se kretanje molekula duž ose cilindra sa presekom *S*, u kratkom vremenskom intervalu τ za koje je prosečna putanja čestice Δ. Pošto su koncentracije sa leve i sa desne strane preseka *E* različite, to će pri istoj pokretljivosti i broj molekula koji prođu kroz presek u smeru $A \to B$ da bude različit od broja molekula koji prođu u suprotnom smeru, $B \to A$. Preseci Q_A i Q_B su na rastojanju Δ od centralnog preseka *E*.

Sada ćemo da utvrdimo kolika se količina rastvorka prenese kroz jediničnu površinu rastvora u vremenskom intervalu τ, kada je poznat prosečni pomak molekula Δ. Zbog jednostavnosti, zamišljamo da sve čestice u intervalu τ imaju isti pomak Δ. Pri tome, jedna polovina od ukupnog broja čestica ima pozitivan pomak +Δ, a druga negativan –Δ. Dakle, umesto pojedinačnih pomaka Δ_1, Δ_2, ... koristimo njihovu srednju vrednost Δ. Sa ovim pojednostavljenjima, u intervalu τ, kroz presek *E*, u pozitivnom smeru *x*-ose mogu da prođu samo molekuli koji su na rastojanju kraćem od Δ, dakle, molekuli zatečeni u oblasti Q_AE, Slika 1.2.2. Međutim, pošto su pozitivni i negativni pomaci podjednako verovatni, to će samo jedna polovina od ukupnog broja molekula (sa pozitivnim pomacima +Δ) iz oblasti Q_AE, da prođe kroz presek *E*. Dakle, količina rastvorene supstance q_A izražena u molovima, koja iz zapremine $S\Delta$, ograničene presecima Q_A i *E*, prođe kroz presek *E*, jednaka je polovini proizvoda srednje molske koncentracije c_A i te zapremine:

$$q_A = \frac{1}{2} c_A S\Delta \cdot \tag{1.2.15a}$$

Rastojanje Δ dovoljno je malo, pa promena koncentracije unutar njega može da se smatra linearnom. Tada je srednja molska koncentracija c_A jednaka koncentraciji sloja u preseku x_A, Slika 1.2.2. Na sličan način nalazimo da je količina rastvorka u molovima q_B, koja u intervalu τ prođe kroz presek *E* iz smera komore *B*, gde je prosečna koncentracija c_B:

$$q_B = \frac{1}{2} c_B S\Delta \cdot \tag{1.2.15b}$$

Kao i u prethodnom slučaju, srednja koncentracija c_B može da se smatra trenutnom koncentracijom sloja na koordinati x_B. Ukupna količina rastvorka koja difunduje u pozitivnom smeru *x*-ose jednaka je razlici izraza (1.2.15a) i (1.2.15b):

$$q_A - q_B = \frac{1}{2} (c_A - c_B) S\Delta \,. \tag{1.2.16}$$

Najzad, deljenjem izraza (1.2.16) površinom *S* i intervalom τ, nalazimo fluks (broj molova koji prođe kroz jediničnu površinu u jedinici vremena):

$$J_c = \frac{q_A - q_B}{\tau S} = \frac{1}{2\tau}(c_A - c_B)\Delta\,. \tag{1.2.17}$$

Imajući na umu da je $\Delta = dx$, Slika 1.2.2, gradijent koncentracije možemo da izrazimo kao:

$$\frac{dc}{dx} = \frac{c_B - c_A}{\Delta} \tag{1.2.18}$$

odakle je:

$$c_A - c_B = -\frac{\mathrm{dc}}{dx}\Delta. \tag{1.2.19}$$

Zamenom poslednjeg izraza u jednačinu (1.2.17) sledi:

$$J_c = -\frac{1}{2}\frac{\Delta^2}{\tau}\frac{dc}{dx} \tag{1.2.20}$$

odakle upoređivanjem sa izrazom (1.2.4a) dobijamo koeficijent difuzije D, izražen preko srednjeg pomaka čestice duž pravca x-ose Δ u proizvoljnom intervalu τ:

$$D = \frac{1}{2}\frac{\Delta^2}{\tau}\,. \tag{1.2.21}$$

Strogo govoreći, pošto su putanje čestica nezavisne, usrednjavanje treba da se vrši preko kvadrata pojedinačnih pomaka, a ne preko njihovih apsolutnih vrednosti. Stoga, u izrazu (1.2.21) umesto kvadrata srednje vrednosti pomaka Δ^2 treba da stoji srednja vrednost kvadrata pomaka $\langle \lambda_x^2 \rangle$, gde je saglasno izrazu (D-1.2.19):

$$\langle \lambda_x^2 \rangle = \frac{\Delta_1^2 + \Delta_2^2 + \ldots + \Delta_n^2}{n}\,, \tag{1.2.22}$$

dakle:

$$D = \frac{1}{2}\frac{\langle \lambda_x^2 \rangle}{\tau}\,. \tag{1.2.23}$$

Koren srednje vrednosti kvadrata pomaka $\sqrt{(\lambda_x^2)}$ možemo da smatramo prosečnim pomakom za sve molekule u pravcu x-ose i u intervalu τ. Rešavanjem dobijene jednačine po prosečnom pomaku (korenu srednje vrednosti kvadrata pomaka) nalazimo

$$\sqrt{\langle \lambda_x^2 \rangle} = \sqrt{2D}\,\sqrt{\tau} \tag{1.2.24a}$$

ili zamenom koeficijenta difuzije iz jednačine (1.2.13):

$$\sqrt{\langle \lambda_x^2 \rangle} = \sqrt{\frac{RT}{N}\frac{1}{3\pi\eta a}}\,\sqrt{\tau}\,. \tag{1.2.24b}$$

Iz dobijene jednačine vidimo da je prosečni pomak molekula proporcionalan ne vremenskom intervalu, τ, nego njegovom korenu. To je posledica slučajne prirode kretanja, gde se putanje podjednako verovatno sabiraju i oduzimaju. Jednačina (1.2.24a) matematički izražava činjenicu da je putanja u pravcu x-ose, u intervalu τ, zbir velikog broja elementarnih skokova molekula čiji su pravci i dužine slučajni. Jednačinom (1.2.24b) matematički se izražava termalno kretanje molekula; jednačina pruža mogućnost da se ovo kretanje poveže sa osobinama rastvarača (viskoznost, η), rastvorka (poluprečnik molekula, a) i sa spoljašnjim uslovima (temperatura, T).

Prema shvatanju u molekulskoj kinetici (na kojem se zasniva atomska hipoteza) između rastvorenih molekula i suspendovanih čestica ne postoji suštinska razlika. Zbog toga jednačine (1.2.24) jednako važe za prave molekulske rastvore, kao i za suspendovane sferne čestice. Dakle, jednačine (1.2.24) kvantitativno opisuju Braunovo kretanje. Pošto parametri Braunovog kretanja, u principu, mogu da se eksperimentalno mere (poluprečnik čestice i njen prosečni pomak u zadatom vremenskom intervalu), Ajnštajn je jednačinu (1.2.24b) iskoristio da na još jedan način poveže eksperimentalno merljive veličine sa Avogadrovim brojem, ključnim parametrom atomske hipoteze. Rešavanjem jednačine (1.2.24b) po N nalazimo:

$$N = \frac{\tau}{\langle \lambda_x^2 \rangle} \frac{RT}{3\pi\eta a} . \tag{1.2.25}$$

Jednačinu (1.2.25) Ajnštajn je prokomentarisao rečima: *„Treba se nadati da će neki istraživač ubrzo uspeti da reši ovde navedeni problem koji je toliko važan za teoriju toplote."* (Pitanje atomističke hipoteze Ajnštajn je rešavao u okviru molekulske teorije toplote.) I zaista, nije se dugo čekalo: Žan Peren je u periodu 1908–1909, serijom genijalnih ogleda, eksperimentalno potvrdio svaku Ajnštajnovu jednačinu.

1.2.2 Perenovi ogledi

Peren je atomsku hipotezu branio argumentima sličnim Ajnštajnovim. Pošto Braunovo kretanje može da se objasni sudarima suspendovanih čestica sa molekulima rastvarača, onda bi kvantitativnim ispitivanjem Braunovog kretanja moglo da se dokaže da molekuli rastvarača zaista postoje.

Neprekidno trajanje Braunovog kretanja, bez prigušenja tokom vremena, protivureči svakodnevnom iskustvu gde se svako (spontano) kretanje, brže ili sporije, prigušuje pod uticajem trenja. Na primer, kada se vedro vode izlije u kadu[2], ma koliko bilo vrtložno kretanje tečnosti na početku, posle izvesnog vremena prestaće makroskopsko kretanje i tečnost će (posmatrano golim okom) izgledati savršeno mirna. Razmotrimo kako dolazi do smirivanja vidljivog kretanja tečnosti u kadi. Na početku, na putu od vedra do kade, svi molekuli vode imaju brzine približno iste po smeru i intenzitetu. Čim prvi molekuli udare o zidove (dno) kade, taj poredak se narušava jer se molekuli u sudaru sa preprekom odbijaju u svim pravcima i još dodatno sudaraju sa molekulima nadolazeće tečnosti. Posle potpunog izlivanja, voda se i dalje nalazi u vidljivom makroskopskom kretanju, ali se tokom vremena kretanje odvija na sve manjoj skali. Elementi zapremine u kojima molekuli vode imaju

[2] Ovaj Perenov primer pokazuje da kada za kupanje nije inspirisala samo Arhimeda.

približno iste brzine po intenzitetu i smeru postaju sve manji. To može lako da se vidi golim okom ako se u tečnost (vodu) ubaci nerastvorni obojeni prah. Posle izlivanja vode, kretanje čestica praha tokom vremena postaje sve haotičnije u odnosu na čestice u neposrednoj blizini. Dakle, ravnomerno makroskopsko kretanje po celoj zapremini tečnosti tokom vremena prividno prestaje tako što se preraspodeljuje na sve manje delove tečnosti u kojima je kretanje i dalje, manje-više, ravnomerno. Iz toga sledi prirodno pitanje (kao ono Demokritovo) dokle može da se smanjuje element zapremine tečnosti u kojem kretanje zadržava približnu ravnomernost?

Da bi se dao bar približan odgovor, Peren je zaključio da tečnost treba da se posmatra mikroskopski. Međutim, pošto se molekuli tečnosti pod mikroskopom ne vide, u ispitivanu tečnost treba da se ubace, kao pokazivači, mikroskopski vidljive čestice čije će kretanje da „osvetli" kretanje nevidljivih molekula tečnosti. Očigledno, to su uslovi pod kojima je opaženo Braunovo kretanje. Tako je Peren zaključio da ispitivanjem Braunovog kretanja može eksperimentalno da se pokaže da se makroskopsko kretanje u tečnostima usitnjava do pojedinih molekula koji nezavisno mogu da se kreću u svim pravcima. Kada ne bi postojali molekuli, ne bi bilo ni načina da se prvobitno uređeno kretanje tečnosti vremenom pretvori u haotično kretanje.

Perenu je bilo jasno da će njegovi dokazi, ma koliko bili ubedljivi, biti od malog interesa ako ih ne potkrepi čvrstim eksperimentalnim rezultatima. To ga je podstaklo na to da se posveti kvantitativnom eksperimentalnom proučavanju Braunovog kretanja.

Sedimentaciona ravnoteža

Perenu je, kao i Ajnštajnu, bilo jasno da jednačine koje su izvedene za razblažene rastvore ne sadrže ograničenje u pogledu veličine čestice rastvorka i da, zbog toga, važe i za suspenzije. Dakle, jednačina stanja:

$$pV = n\frac{RT}{N} \tag{1.2.26}$$

koja daje vezu između pritiska p, zapremine V i broja molekula n idealnog gasa na temperaturi T, važi i za razblažene rastvore i suspenzije. Deljenjem jednačine (1.2.26) zapreminom V dobija se izraz za osmotski pritisak rastvorka:

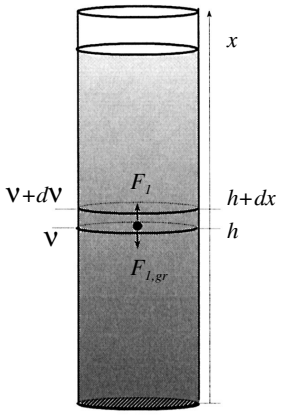
$$p = v\frac{RT}{N}\,, \tag{1.2.2}$$

gde je kao i ranije v koncentracija čestica, $v = n/V$. Slično tome, zakon raspodele (ekviparticije) energije iz kojeg sledi da je prosečna energija po molekulu jednoatomnog gasa proporcionalna apsolutnoj temperaturi gasa:

$$E_1 = \frac{3}{2}\frac{RT}{N} \tag{1.2.27}$$

treba da važi i za razblažene rastvore i suspenzije. Znači, ako je atomistička hipoteza ispravna, prosečna energija suspendovane čestice jednaka je prosečnoj energiji molekula tečnosti. Dakle, nalaženjem prosečne energije suspendovane čestice na os-

novu ispitivanja Braunovog kretanja, može da se nađe prosečna energija jednog molekula tečnosti, a odatle i Avogadrov broj kao ključni parametar atomske hipoteze.



Slika 1.2.3 Sedimentaciona ravnoteža uspostavlja se onda kada se za svaku česticu sila osmotskog pritiska koja gura česticu ka nižim koncentracijama (na gore), izjednači sa gravitacionom silom koja česticu vuče nadole.

Posmatrajmo rastvarač gustine ρ_r u vertikalnom cilindru poprečnog preseka S u koji je na vrhu ubačena koncentrovana suspenzija čije čestice imaju iste dimenzije i gustinu $\rho_č$, Slika 1.2.3. Pod uticajem gravitacione sile, dolazi do taloženja čestica (sedimentacije). Međutim, potpunom taloženju čestica suprotstavlja se sila osmotskog pritiska koja nastoji da čestice rasporedi ravnomerno po celoj zapremini rastvora. Posle dovoljno dugo vremena uspostavlja se (sedimentaciona) ravnoteža, što za posledicu ima vertikalnu raspodelu koncentracija u suspenziji. Brojni su primeri sedimentacione ravnoteže iz svakodnevnog života, počevši od crne kafe nasute u visoku čašu do razblaženog gustog soka, boze, itd. U izvođenju jednačine za sedimentacionu ravnotežu, Peren je koristio dokaze slične Ajnštajnovim, koji su izloženi u prethodnom odeljku. Posmatrao je ravnotežu između osmotskog i hidrostatičkog pritiska rastvorenih čestica u sloju tečnosti na visini h, Slika 1.2.3. Da bismo izbegli ponavljanje, ovde ćemo da iskoristimo Ajnštajnov izraz sa silu osmotskog pritiska po jednoj čestici:

(1.2.10) $$F_1 = \frac{RT}{\nu N}\frac{d\nu}{dx}$$

koja u koncentracionom gradijentu $d\nu/dx$ potiskuje česticu u smeru od veće ka manjoj koncentraciji, Slika 1.2.3. Nasuprot toj sili, deluje sila gravitacije, umanjena zbog potiska, $F_{1,gr}$. Ako su $\rho_č$ i ρ_r gustine čestice i rastvarača, $V_č$ zapremina čestice i g gravitaciono ubrzanje, onda je:

(D-1.2.8) $$F_{1,gr} = (\rho_c - \rho_r) V_č\, g.$$

Indeks 1 označava da se sila odnosi na jednu česticu. U ravnoteži te dve sile su jednake, odakle imamo:

$$-\frac{RT}{\nu N}\frac{d\nu}{dx} = (\rho_č - \rho_r) V_č\, g, \qquad (1.2.28)$$

odnosno:

$$-\frac{dv}{v} = \frac{N}{RT}(\rho_č - \rho_r)V_č\, g\, dx. \tag{1.2.29}$$

Izraz (1.2.29) pokazuje kako se koncentracija čestica v menja pri beskonačno maloj promeni visine dx. Ovaj izraz daje vezu između koncentracije i visine rastvora u diferencijalnom obliku. Ako je na nekoj izabranoj visini h_0 koncentracija čestica v_0, tada koncentraciju v na proizvoljnoj visini h nalazimo integraljenjem jednačine (1.2.29):

$$-\int_{v_0}^{v}\frac{dv}{v} = \int_{h_0}^{h}\frac{N}{RT}(\rho_č - \rho_r)\,V_č\, g\, dx \tag{1.2.30a}$$

koju očiglednim preuređivanjem prevodimo u oblik koji se lako integrali:

$$\int_{v_0}^{v} d\ln v = -\frac{N}{RT}(\rho_č - \rho_r)V_č\, g \int_{h_0}^{h} dx. \tag{1.2.30b}$$

Integraljenjem dobijamo funkciju raspodele suspenzije u gravitacionom polju:

$$\ln\frac{v}{v_0} = -\frac{N}{RT}\,(\rho_č - \rho_r)V_č\, g(h - h_0), \tag{1.2.31a}$$

koja može da se napiše i kao:

$$\nu = \nu_0 \exp\left[-\frac{(\rho_č - \rho_r)V_č g}{\frac{RT}{N}}(h - h_0)\right] \tag{1.2.31b}$$

ili, ako uočimo to da je potencijalna energija čestice u gravitacionom polju $U_{1,gr}$:

$$U_{1,gr} = (\rho_č - \rho_r)\, V_č g h,$$

$$\nu = \nu_0 \exp\left(-\frac{\Delta U_{1,\,gr}}{\frac{RT}{N}}\right). \tag{1.2.31c}$$

Iz izraza (1.2.31b) vidimo da koncentracija suspenzije eksponencijalno opada sa visinom rastvora (kao pritisak u barometarskoj jednačini) a iz jednačine (1.2.31c) da se čestice raspodeljuju saglasno Bolcmanovom zakonu raspodele ($k=R/N$, je Bolcmanova konstanta). Dakle, Perenova jednačina kojom se opisuje raspodela suspendovanih čestica u gravitacionom polju, predstavlja poseban slučaj Bolcmanove raspodele.

Za potvrdu atomističke hipoteze, najvažnije je iz izraza (1.2.31a) pronaći vezu između Avogadrovog broja i makroskopski merljivih veličina:

$$N = \frac{RT}{(\rho_č - \rho_r)V_č g(h - h_0)} \ln\frac{\nu_0}{\nu}. \qquad (1.2.32)$$

Dakle, Avogadrov broj može da se odredi iz sedimentacione ravnoteže merenjem koncentracije čestica na dve visine rastvora u suspenziji sa poznatim dimenzijama jednakih čestica.

Za eksperimentalnu potvrdu ispravnosti jednačine (1.2.32) Peren je načinio prilično jednostavnu aparaturu koja je šematski prikazana na Slici 1.2.4. Monodisperzna emulzija (sačinjena od čestica istih dimenzija) u kojoj se ispituje raspodela čestica u gravitacionom polju, hermetički je zatvorena između predmetne i pokrivne pločice mikroskopa. Mikroskop ima malu dubinsku oštrinu tako da se u polju vide samo čestice koje su u žižnoj ravni. (Zbog male dubinske oštrine lik čestica iznad i ispod žižne ravni vrlo je zamućen i one se praktično ne vide.) Položaj žižne ravni lako se određuje preko mikrometarskog zavrtnja kojim se po želji menja visina objektiva mikroskopa. Pošto su čestice u neprekidnom kretanju, njihovo prebrojavanje na odabranoj visini vrlo je teško jer se slika pod mikroskopom neprekidno menja. Peren je taj problem rešio tako što je napravio vrlo usko vidno polje u kojem se jednovremeno nije videlo više od pet do sedam čestica. Tada nije potrebno da se čestice broje, već njihov broj može da se odredi iz zapamćene slike. Eksperiment je izvodio tako što je na datoj visini, svakih 15 sekundi, zapisivao broj opaženih čestica u vidnom polju. Broj čestica, na datoj visini, nalazio je sabiranjem dugih serija brojeva. Relativni broj čestica na različitim visinama nalazio je upoređivanjem serija iste dužine.

Mada je u osnovi ogled vrlo jednostavan (meri se broj čestica u žižnoj ravni na dve visine) praktični problemi, koje je Peren, zahvaljujući svojoj spretnosti, uspešno rešavao, bili su ogromni. Trebalo je da se napravi suspenzija od čestica istih dimenzija (monodisperzna suspenzija), da se odrede dimenzije čestica, njihova gustina i broj na odabranoj visini. Peren je za pravljenje suspenzije koristio lateks[3] i mastiks[4], a čestice sortirao višestrukim centrifugiranjem suspenzija pri različitim brzinama rotacije. Na primer, posle centrifugiranja pri maloj brzini rotacije, najkrupnije čestice se talože, dok one sitnije i dalje ostaju u rastvoru. Odvajanjem takvog rastvora i centrifugiranjem pri većoj brzini talože se nove čestice, dok one najsitnije i dalje ostaju u rastvoru. Višestrukim centrifugiranjem i razdvajanjem različitih frakcija, Peren je uspevao da dobije monodisperzne suspenzije sa poluprečnikom čestica od 0,14 μm do 0,54 μm. Poluprečnik čestica određivao je merenjem brzine sedimentacije (po Stoksovom zakonu) ili taloženjem čestica na zidove posude i premeravanjem dužine ravnomernih nizova čestica. (Neposredno merenje poluprečnika čestice posmatranjem pojedinačnih čestica bilo je vrlo netačno, jer su granice čestice nejasne zbog difrakcije.) Gustinu čestica određivao je pomoću piknometra, upoređivanjem gustine vode sa gustinom suspenzije poznate koncentracije čestica ili neposredno, merenjem gustine smole izdvojene posle isparavanja vode iz suspenzije.

[3] Lateks (latex) mlečni sok različitih vrsta tropskog drveća (*Hevea brasiliensis, Ficus elastica, Teraxacum gymnathum*). Zasecanjem kore stabla sakuplja se mlečni sok koji se zagrevanjem i drugim načinima pretvara u kaučuk.

[4] Mastiks, mirišljava smola iz mediteranskog zimzelenog grma vrste *Pistacia lentiscus*, pored alkohola, glavni sastojak rakije mastike (Makedonija) i uza (Grčka). Mastika je bezbojna ali kada se sipa u vodu rastvor pobeli kao mleko. Zbog male rastvorljivosti mastiks se izdvaja iz rastvora u obliku mikronski sitnih sfernih čestica. „*Dobro spravljena mastika je vrlo prijatan i koristan napitak pod uslovom da se umereno troši, jer ima sva blagotvorna svojstva morača.*" J. Tucakov, *Lečenje biljem*.

Slika 1.2.4 Perenova aparatura za merenje raspodele čestica u suspenziji.

Peren je vršio brojna merenja menjajući stalno eksperimentalne uslove i uvek je nalazio slične vrednosti za Avogadrov broj. Bio je naročito ponosan na seriju merenja u kojoj je koristio čestice poluprečnika 0,212 μm. Posle prebrojavanja ukupno 13 000 čestica na četiri visine, Peren je dobio da je $N = 7{,}05 \times 10^{23}$ čestica po molu. U serijama merenja sa suspenzijama od različitih materijala, gde se masa čestica menjala 40 puta, razlika gustina čestica i rastvarača pet puta, a brzina promene koncentracije čestica sa visinom 30 puta, Peren je iz jednačine (1.2.32) nalazio da je Avogadrov broj između 5×10^{23} i 8×10^{23} čestica po molu. Iz toga je zaključio da je *„vrlo teško poreći objektivnu stvarnost molekula"*.

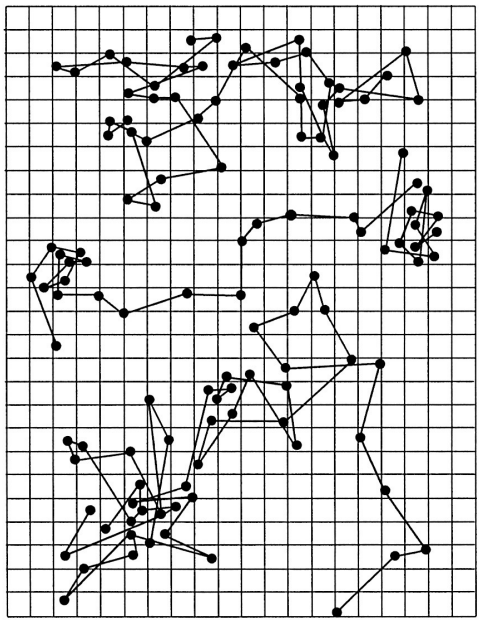
Putanje čestica u Braunovom kretanju

Za praćenje putanja pojedinačnih čestica, Peren je mikroskopsku sliku projektovao na zaklon na kojem su mogli da se zapisuju položaji čestice u jednakim vremenskim intervalima. Na Slici 1.2.5 prikazana su tri primera putanja čestica. Tačkama su obeležni položaji čestica na svakih 30 sekundi. Ako bi se položaj čestice beležio češće, recimo svake sekunde, tada bi se pravolinijska putanja između dve susedne tačke izlomila na 30 (kraćih) delova čiji su pravci i veličine slučajni. Zbog toga putanje različitih čestica, na prvi pogled, nemaju međusobno ničeg zajedničkog, kao što ni kraj jedne putanje nema ništa sa njenim početkom. Međutim, kako je Ajnštajn pokazao, pošto su putanje vektorske veličine, za njih mogu da se nađu komponente u izabranom pravcu. Sve putanje mogu da se opišu zajedničkim srednjim kvadratnim pomakom u izabranom pravcu, recimo x-ose $\langle \lambda_x^2 \rangle$. Tada se pomoću jednačine (1.2.22) za putanje dobijene kao na Slici 1.2.4 može izračunati srednji kvadratni pomak iz kojeg se Avogadrov broj dobija iz izraza:

$$N = \frac{RT}{\langle \lambda_x^2 \rangle} \frac{\tau}{3\pi\eta a}, \tag{1.2.25}$$

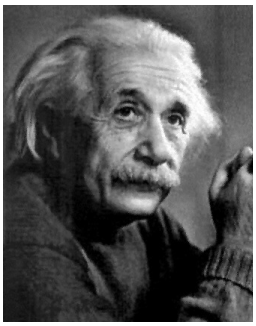
gde je R gasna konstanta, T apsolutna temperatura, τ interval u kojem se posmatra srednji kvadratni pomak, η viskoznost rastvarača i a poluprečnik sferne čestice. I zaista, u seriji pažljivo vođenih eksperimenata, sa emulzijama u kojima je poluprečnik čestica lateksa iznosio 0,212 μm, Peren je, sa svojim studentom, merio putanje 50 čestica u četiri intervala od po 30 s. Iz prve serije merenja sa 50 čestica dobili su

vrednost $N = 7{,}3 \times 10^{23}$ čestica po molu, iz druge serije sa novih 50 čestica, N = 6,8 $\times 10^{23}$ čestica po molu. U trećoj grupi od 50 čestica viskoznost rastvora povećana je pet puta dodavanjem šećera. Prema predviđanjima teorije, jednačina (1.2.24b), opao je srednji pomak čestica, a za Avogadrov broj dobijena je vrednost od $5{,}6 \times 10^{23}$ čestica po molu.



Slika 1.2.5 Putanje čestica u Braunovom kretanju kako ih je Peren video u svojim ogledima. Mada skale nisu date, po svoj prilici vreme između susednih tačaka je oko 30 sekundi, a skala je oko 10 mikrona. Važno je da se uoči da je putanja između naznačenih tačaka (spojenih pravim linijama) isto tako haotična kao i celokupne putanje.

Peren je zaključio da svi izvedeni eksperimenti, van svake sumnje ukazuju na ispravnost molekulske (atomističke) hipoteze i da atomistici treba da se veruje u istoj meri kao i energetici.[5] *„U suštini, nema razloga da se ove dve velike discipline suprotstavljaju jedna drugoj, kada obe (Atomistika i Energetika) mogu da slave svoj trijumf"*. Za eksperimentalnu potvrdu atomističke hipoteze, godine 1926, Peren je dobio Nobelovu nagradu za fiziku.



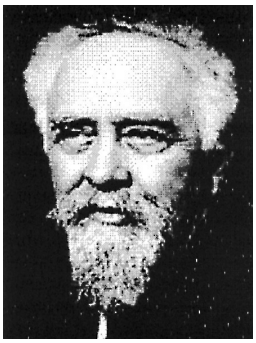
Albert Ajnštajn (Albert Einstein, 1879–1955), rođen je u Ulmu (Nemačka), a studirao je na Ciriškom univerzitetu. Kao „tehnički stručnjak treće klase" u patentnom uredu u Bernu, publikovao je tri najvažnija rada. U radu *O teoriji Braunovog kretanja* izložio je neposredni dokaz, zasnovan na čisto klasičnoj slici o atomističkoj strukturi materije. U radu *O elektrodinamici tela u kretanju* postavio je temelje specijalne teorije relativnosti iz koje je nekoliko meseci kasnije izveo čuvenu jednačinu o jednakosti mase i energije, $E = mc^2$. U trećem radu *O heurističkom pogledu na stvaranje i preobražaj svetlosti* proširio je Plankov kvantni pristup postulirajući dvojnu prirodu svetlosti. Pojam svetlosnih kvanta bio je previše radikalan i najveći broj fizičara primio ga je sa velikom

[5] Protivnici atomisitčke hipoteze, predvođeni Osvaldom, postavili su doktrinu koju su nazivali „energetikom".

sumnjom. Situacija se veoma izmenila tek kada je Bor 1913. godine izložio novu teoriju o strukturi atoma. Ajnštajn je bio profesor na univerzitetu u Cirihu (1909), Pragu (1911) i ponovo (1912) u Cirihu, ovoga puta u Švajcarskom institutu za tehnologiju (ETH). Godine 1913. odlazi u Berlin gde je postao član Pruske akademije nauka i direktor Instituta za fiziku „Kajzer Vilhelm". U periodu 1914–1915. razvio je opštu teoriju relativnosti, polazeći od stroge proporcionalnosti gravitacione i inercione mase. Široj javnosti postao je poznat tek pošto su predviđanja opšte teorije relativnosti bila potvrđena eksperimentalno, osmatranjem uticaja sunčeve gravitacije na svetlost udaljenih zvezda. Godine 1933. zbog svog porekla i političkih uverenja napušta Nemačku i prelazi u SAD, gde nastavlja da radi u Institutu za savremena istraživanja u Prinstonu. Nobelovu nagradu za fiziku dobio je 1921. godine za zasluge u teorijskoj fizici a posebno za otkriće zakona fotoelektričnog efekta.

Ludvig Bolcman (Ludwig Boltzmann, 1844–1906), austrijski fizičar. Rođen je u Beču, gde je studirao fiziku i zatim bio asistent Jožefa Štefana. Profesor matematičke fizike u Gracu postao je 1869. godine. Takođe je predavao u Beču, Minhenu i Lajpcigu. Njegovi studenti su, između ostalih, bili Svante Arenijus, Valter Nernst i Liza Majtner. U mladosti, uspešno se bavio eksperimentalnom fizikom: za sumpor je pokazao vezu između indeksa prelamanja i dielektrične konstante kako je predviđao Maksvel. Glavna tema njegovog istraživačkog rada bila je svođenje termodinamike na mehaniku, zbog čega je bilo potrebno da se objasni protivrečnost između reverzibilnosti mehaničkih i ireverzibilnosti termodinamičkih procesa. Bolcman je uspostavio vezu između entropije S i verovatnoće, W, $S = k \ln W$, gde je k Bolcmanova konstanta. Bila je to tačka oslonca za postavljanje kvantne teorije u formulaciji M. Planka, 1900. godine i u proširenom Ajnštajnovom tumačenju iz 1905. godine. Druga važna Bolcmanova dostignuća jesu jednačine za raspodelu energija atoma koji se slobodno kreću (Maksvel-Bolcmanova raspodela) i teorijsko objašnjenje emisione sposobnosti crnog tela, Štefan-Bolcmanov zakon iz 1884. godine.

Bolcman je bio istaknut pobornik atomske teorije. Zbog slabog odziva, čak i otpora njegovim teorijama, veći deo života proveo je duboko razočaran. Nije doživeo konačnu pobedu svojih teorija koja je ostvarena 1905. Ajnštajnovom teorijom Braunovog kretanja. Godine 1906., u 62. godini života, izvršio je samoubistvo.



Žan Batist Peren (Jean Baptiste Perrin, 1870–1942) rođen je u Lilu (Francuska), a studirao je u Parizu. Od 1910. do 1940. bio je profesor fizičke hemije na Univerzitetu u Parizu. Godine 1895. utvrdio je da su katodni zraci negativno naelektrisane čestice (elektroni). U pokušajima da odredi masu tih čestica pretekao ga je J. J. Tomson. Oko 1908. počeo je da ispituje Braunovo kretanje. Godine 1926. dobio je Nobelovu nagradu za fiziku za rad na diskontinualnoj strukturi materije, a naročito za otkriće sedimentacione ravnoteže.

2. ATOM ELEKTRICITETA – ELEMENTARNO NAELEKTRISANJE

2.1 NAELEKTRISANJE ELEKTRONA – MILIKENOV OGLED

DODATAK 2.1

D-2.1.1 Elektrostatička sila

Na naelektrisanje q u električnom polju $\vec{E}$ deluje sila $\vec{F}_e$ koja je proporcionalna jačini polja i naelektrisanju:

$$\vec{F}_e = q\vec{F}. \qquad \text{(D-2.1.1)}$$

Neposredno posle otkrića elektrona (J. J. Thomson, 1897), bilo je logično da se tačno odrede njegove osobine. Tomson je već odredio odnos naelektrisanja i mase elektrona *e/m* i pokazao da je taj odnos stalan. Sledeći logičan korak trebalo je da bude nezavisno i posebno određivanje mase i naelektrisanja. Međutim, ozbiljan problem predstavljala je činjenica da jedna od ovih veličina ne može da se meri nezavisno od druge. Pri svakom eksperimentu za merenje inercionih osobina elektrona (mase), mora da se uzme u obzir i njegovo naelektrisanje pošto elektron, u praksi, može da se ubrza samo električnim i magnetnim poljem. S druge strane, naelektrisanje bi moglo da se odredi nezavisno od mase, pod uslovom da je u ponovljenim ogledima uvek jedno te isto.

Osnovni problem pri eksperimentalnom određivanju atomskih i molekulskih osobina materije sastoji se u tome kako da mikroskopsku veličinu koju želimo da odredimo, povežemo sa makroskopskim pojavama i osobinama materije koje možemo da opažamo čulima ili uređajima. Drugim rečima, potrebno je smisliti ogled u kojem će se mikroskopske osobine materije ispoljiti na makroskopskim pojavama u obliku u kojem mogu tačno da se mere.

I pre Tomsonovih eksperimenata bilo je pokušaja da se proceni veličina jediničnog naelektrisanja. Godine 1881. Stonej (G. J. Stoney) procenio je da je $e = 3 \times 10^{-11}$ e.s.j. ($e = 1 \times 10^{-20}$ C), što je približno deset puta manje od prave vrednosti. Uzgred rečeno, Stonej je bio taj koji je 1891. godine predložio naziv **elektron** za „prirodnu" jedinicu naelektrisanja.

Još bolju procenu vrednosti jediničnog naelektrisanja učinio je Mejer (O. E. Meyer) na osnovu kinetičke teorije, $e = 3 \times 10^{-10}$ e.s.j. ($e = 1 \times 10^{-19}$ C). Sličnu vrednost dobio je i Taunsend (J. S. E. Townsend) koji je, radeći u Tomsonovoj laboratoriji, posmatrao brzinu taloženja naelektrisanog oblaka vodene pare. Godine 1903. sličan eksperiment pokušali su da ponove nezavisno Tomson i Vilson (J. J. Thomson i H. A. Wilson) ne bi li dobili tačniju vrednost, ali bez većeg uspeha. Glavnu teškoću predstavljalo je reprodukovanje potpuno jednakih uslova prilikom građenja naelektrisanih oblaka.

Eksperimentalno određivanje naelektrisanja elektrona prvi je uspešno obavio, 1911. godine, Robert Miliken (Robert A. Millikan, 1863–1953) za šta je dobio Nobelovu nagradu 1923. godine. Miliken je ubedljivo pokazao diskretnost naelektrisanja i dao značajan doprinos atomskoj teoriji o strukturi materije. U prvoj dekadi dvadesetog veka bilo je još onih koji su smatrali da teorija kontinualnog nalektrisanja i materije može jednako dobro da objasni sve do tada poznate eksperimentalne činjenice.

Za određivanje naelektrisanja elektrona, Miliken je smislio genijalno jednostavan ogled u kojem je posmatrao kretanje naelektrisanih kapljica ulja u vazduhu pod uticajem električnog polja i Zemljine teže.

Pod uticajem Zemljine teže na kapljicu mase m_k deluje sila, $\vec{F}_g$:

$$\vec{F}_g = m_k\vec{g}\,. \tag{2.1.1}$$

Pošto je potopljena u fluid (vazduh) gustine d_v, na kapljicu deluje i sila potiska $\vec{F}_p$, koja je jednaka težini kapljicom istisnutog vazduha:

$$\vec{F}_p = -m_v\vec{g}\,. \tag{2.1.2}$$

Na kapljicu poluprečnika a, koja pod uticajem sile Zemljine teže pada kroz vazduh brzinom $\vec{\upsilon}$, deluje sila trenja $\vec{F}_{tr}$, kao posledica viskoznosti vazduha:

$$\vec{F}_{tr} = -6\pi\eta a\vec{\upsilon} \tag{2.1.3}$$

gde je η koeficijent viskoznosit vazduha. Zbog ubrzanog padanja kapljice njena brzina raste, pa otuda raste i sila trenja koja je proporcionalna brzini padanja. Pri nekoj graničnoj brzini padanja $\vec{\upsilon}_g$, uspostavlja se ravnoteža sila, $\vec{F}_g + \vec{F}_p + \vec{F}_{tr} = 0$ (ili $F_g - F_p = F_{tr}$) i kapljica pada stalnom graničnom brzinom υ_g:

$$(m_k - m_v)\, g = 6\,\pi\, a\, \upsilon_g. \tag{2.1.4}$$

Ako znamo gustinu kapljice d_k i gustinu vazduha d_v, odgovarajuće mase iz izraza (2.1.4) možemo da izrazimo preko zapremine kapljice V_k:

$$m_k = d_k\, V_k \qquad\qquad m_v = d_v V_k. \tag{2.1.5}$$

Tada iz izraza (2.1.4) dobijamo:

$$V_k\, g\, (d_k - d_v) = 6\,\pi\,\eta\, a\, \upsilon_g \tag{2.1.6}$$

ili, s obzirom na to da je $V_k = 4\,\pi a^3/3$, posle skraćivanja:

$$2a^2\,(d_k - d_v)\,g = 9\eta\upsilon_g. \tag{2.1.7}$$

Iz izraza (2.1.7), pošto su nam gustine kapljice i vazduha poznate, kao i viskoznost vazduha, merenjem brzine kojom kapljica pada pod uticajem sile Zemljine teže, možemo da odredimo njen poluprečnik:

$$a = \sqrt{\frac{9\eta \upsilon_g}{2(d_k - d_\upsilon)g}}. \tag{2.1.8}$$

U ovom slučaju, za povezivanje makroskopski merljivih veličina i mikroskopskih veličina koje želimo da odredimo (dimenzije kapljice su tako male da ne mogu da se odrede neposrednim putem, na primer, pomoću mikroskopa), iskorišćen je Stoksov zakon.

Razmotrimo sada kretanje iste kapljice koja nosi naelektrisanje q u električnom polju E. Na kapljicu tada deluje dodatna elektrostatička sila $\vec{F}_e$, saglasno izrazu (D-2.1.6). Pravac električnog polja E može da se odabere tako da se pod njegovim uticajem kapljica kreće naviše. Tada se pri dostizanju granične brzine kretanja kapljice υ_E, u ravnoteži nalaze sve četiri sile:

$$\vec{F}_g + \vec{F}_p + \vec{F}_{tr} + \vec{F}_e = 0, \tag{2.1.9}$$

ili pošto potisak i električno polje deluju u jednom smeru (na gore), a Zemljina teža i trenje u drugom (nadole):

$$F_g + F_{tr} = F_p + F_e. \tag{2.1.10}$$

Zamenom sila iz jednačina (2.1.1), (2.1.2), (2.1.3) i (D-2.1.1) u izrazu (2.1.10) i preuređivanjem dobijamo:

$$(m_k - m_\upsilon)\, g + 6\,\pi\eta a \upsilon_e = qE, \tag{2.1.11}$$

a zamenom prvog člana iz jednačine (2.1.4):

$$6\,\pi\eta a \upsilon_g + 6\,\pi\eta a \upsilon_E = qE. \tag{2.1.12}$$

Odatle se za naelektrisanje kapljice dobija:

$$q = 6\pi a\eta \frac{\upsilon_g + \upsilon_E}{E}. \tag{2.1.13}$$

Konačno, uvrštavajući poluprečnik kapljice iz jednačine (2.1.8), dobijamo izraz pomoću kojeg može da se odredi apsolutno naelektrisanje kapljice, na osnovu merenja brzine njenog kretanja u električnom polju i van njega:

$$q = \frac{9\pi}{E}\sqrt{\frac{2\eta^3 \upsilon_g}{(d_k - d_\upsilon)g}}(\upsilon_g + \upsilon_E). \tag{2.1.14}$$

Ako se za vreme ogleda kapljica preelektriše (promeni naelektrisanje), tada će za novo naelektrisanje q' kapljica da ima i novu brzinu υ_E':

$$q' = \frac{9\pi}{E}\sqrt{\frac{2\eta^3 \upsilon_g}{(d_k - d_\upsilon)g}}(\upsilon_g + \upsilon_E'). \tag{2.1.15}$$

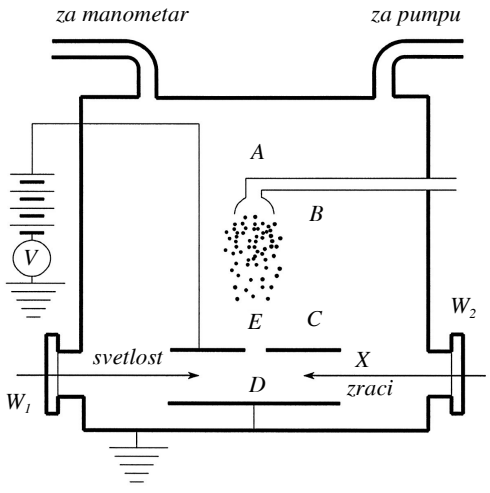
Pošto u toku eksperimenta sa jednom istom kapljicom može da se izvrši veliki broj merenja, pri čemu kapljica može i da se preelektriše, tada se promena količine naelektrisanja $\Delta q = q' - q$ dobija iz razlike izraza (2.1.14) i (2.1.15):

$$\Delta q = \frac{9\pi}{E}\sqrt{\frac{2\eta^3 \upsilon_g}{(d_k - d_\upsilon)g}}(\upsilon_E' - \upsilon_E)\,. \tag{2.1.16}$$

Izvodeći brojne oglede preelektrisavanja kapljica, Miliken je pronašao, saglasno očekivanjima, da se preelektrisavanje odvija skokovito. Pri tome je utvrdio da svako preelektrisavanje može da se izrazi kao celobrojni umnožak jedinice naelektrisanja e koja iznosi:

$$e = 1{,}592 \times 10^{-19}\ \text{C}. \tag{2.1.17}$$

Za praktično ostvarenje ovog ogleda potrebno je da se vrlo dobro odrede i da se proveravaju brojni eksperimentalni parametri koji neposredno ili posredno mogu da utiču na ishod eksperimenta. To znači da je neophodna puna kontrola promenljivih s desne strane jednačine (2.1.16). Na Slici 2.1.1 šematski je prikazana Milikenova aparatura za određivanje naelektrisanja elektrona. Električni kondenzator sa paralelnim pločama *C, D*, smešten je u komoru *A* u kojoj pritisak vazduha može da se menja i meri pomoću pumpe i manometra. Kapljice ulja obrazovane raspršivačem *B*, pod uticajem gravitacije padaju na gornju ploču kondenzatora na kojoj se nalazi mali otvor *E*.



Slika 2.1.1 Milikenova aparatura za određivanje naelektrisanja elektrona.

Kada se primeti da je kapljica ulja prošla kroz otvor, on se zatvori, a vazduh između ploča kondenzatora jonizuje se *x*-zracima koji prolaze kroz prozorčić W_2. Kapljica ulja zahvatajući gasni jon i sama postaje naelektrisana, pa tim i podložna delovanju električnog polja kondenzatora. S obzirom na to da pravac i jačina polja mogu da se menjaju proizvoljno, u kombinovanom električnom i gravitacionom polju naelektrisana kapljica kreće se naviše ili naniže. Kroz prozorčić, W_1 ulazi jak snop svetlosti koji se na kapljici raspršuje, a što se opaža durbinom postavljenim normalno na pravac upadnog snopa. Zbog izuzetno malih dimenzija, kapljica se vidi samo kao svetla tačkica na tamnoj podlozi. Brzina padanja kapljice υ_g pod uticajem gravitacionog polja određuje se tako što se meri vreme njenog prolaska između dva podeoka na okularu durbina. Za to vreme baterija kojom se napaja kondenzator je isključena, a ploče kondenzatora su kratko spojene. Zatim se između ploča uspostavi visoki napon 5000–10000 volti (koji se

meri voltmetrom *V*) i to tako da se kapljica pod uticajem električnog polja kreće naviše. Ponovo se meri vreme prolaska kapljice između dva podeoka, ovoga puta pod uticajem i električnog i gravitacionog polja, iz čega se određuje brzina v_E. Na osnovu tih merenja naelektrisanje kapljice određuje se primenom izraza (2.1.14). Ako se između dva merenja kapljica preelektriše, određivanjem nove brzine kretanja kapljice v_E', pomoću izraza (2.1.16), izračunava se promena naelektrisanja kapljice.

Merenjem naelektrisanja velikog broja kapljica, Miliken je našao da sva naelektrisanja mogu da se izraze kao celobrojni umnošci najmanje količine naelektrisanja. On je tu količinu naelektrisanja označio kao naelektrisanje jednog elektrona. Najbolji rezultat koji je Miliken dobio, jednačina (1.2.17), vrlo je blizak danas prihvaćenoj najboljoj vrednosti:

$$e = -\,1{,}602176462(63) \times 10^{-19}\ \mathrm{C}. \tag{2.1.18}$$

Deljenjem njegovog eksperimentalnog rezultata za e sa poznatom vrednošću za odnos e/m, Miliken je izračunao masu elektrona. Najtačnija vrednost za masu elektrona, koja je danas prihvaćena, iznosi:

$$m_e = 9{,}10938188(72) \times 10^{-31}\ \mathrm{kg}. \tag{2.1.19}$$

Naelektrisanje e iz jednačine (2.1.18) predstavlja osnovni kvant (atomsku jedinicu) naelektrisanja. Naelektrisanja svih čestica otkrivenih u prirodi su celobrojni umnošci ovog osnovnog kvanta naelektrisanja, tj. naelektrisanja su uvek 0, $\pm e$, $\pm 2e$, $\pm 3e$, itd. U slučaju jona ovo pravilo kvantovanja je očigledno: jon je atom ili molekul koji je izgubio ili primio jedan ili više elektrona, pa je otuda njegovo naelektrisanje celobrojni umnožak elementarnog naelektrisanja. Međutim, pravilo kvantovanja naelektrisanja takođe važi i za subatomske čestice i sve elementarne čestice. Na primer, naelektrisanje neutrona je nula, protona + e, alfa-čestice (jezgra helijuma) + $2e$, miona - e, pozitivnog piona + e, itd.

Odskora, mnogo se radi na pronalaženju naelektrisanja $\pm e/3$ i $\pm 2e/3$, koja odgovaraju kvarkovima od kojih su sačinjeni protoni i neutroni (videti 12. poglavlje). Međutim, do danas, takvo podeljeno (frakciono) naelektrisanje, niti bilo koje drugo, nije pronađeno. Iz nedavno izvršenih merenja sledi da na svakih 10^{19} protona može da se pojavi manje od jednog slobodnog kvarka. Drugim rečima, najmanje slobodno naelektrisanje opaženo eksperimentalnim putem je elementarno naelektrisanje elektrona.

Primeri

Primer 2.1.1 Kolika potencijalska razlika treba da se uspostavi između kondenzatorskih ploča čiji razmak iznosi 5 mm, da bi se uravnotežila kapljica ulja koja nosi naelektrisanje jednako petostrukom naelektrisanju elektrona? Masa kapljice iznosi $3{,}119 \times 10^{-13}$ g.

REŠENJE:

Iz uslova za ravnotežu elektrostatičke i gravitacione sile dobijamo:

$$qE = mg.$$

Električno polje kondenzatora sa paralelnim pločama količnik je potencijalske razlike između ploča i njihovog međusobnog rastojanja:

$$E = \frac{U}{S}.$$

Iz ova dva izraza sledi da je potencijalska razlika U:

$$U = \frac{mgs}{q}$$

ili, s obzirom na to da je $q = 5e$, s=0,005 m, $m = 3{,}119\text{x}10^{-16}$ kg, i g = 9,81 m/s^2:

$$U = \frac{3{,}119 \times 10^{-16} \times 9{,}81 \times 0{,}005}{5 \times 1{,}6 \times 10^{-19}}$$

$$U = 19{,}1\ V.$$

Zadaci

Z–2.1.1 Izračunati brzinu padanja kapljice ulja gustine 0,98 g/cm^3, sa poluprečnikom 10^{-4} cm, u vazduhu čiji je koeficijent viskoznosti $1{,}832\text{x}10^{-4}$ poaza.

[0,0117 cm/s]

Z–2.1.2 Potencijalska razlika od 31,5 V saopštena kondenzatorskim pločama koje su međusobno udaljene 1 cm, održava kapljicu ulja u kretanju naviše brzinom od 10 podeoka za 10 sekundi (50 podeoka = 1 mm). Brzina padanja pod dejstvom sile teže iznosi 10 podeoka za 100 sekundi. Koeficijent viskoznosti vazduha je 1,8 x 10^{-4} P ($gcm^{-1}\ s^{-1}$). Gustina kapljice je 0,90 g/cm^3. Koliko elektrona nosi kapljica? [1]

2.2 KRETANJE ELEKTRONA (NAELEKTRISANE ČESTICE) U ELEKTRIČNOM I MAGNETNOM POLJU

DODATAK 2.2

D–2.2.1 Prikazivanje II Njutnovog zakona

II Njutnov zakon najčešće se predstavlja preko ubrzanja, u obliku koji je dat izrazom (D–1.2.2):

$$\vec{F} = m\vec{a}. \qquad \text{(D-2.2.1a)}$$

S obzirom na vezu između ubrzanja $\vec{a}$, brzine $\vec{\upsilon}$ i pređenog puta $\vec{s}$,

$$\vec{a} = \vec{\upsilon}' = \frac{d\vec{\upsilon}}{dt} = \vec{s}'' = \frac{d^2\vec{s}}{dt^2}.$$

II Njutnov zakon može da se izrazi i jednačinama:

$$\vec{F} = m\frac{d\vec{\upsilon}}{dt} = m\vec{\upsilon}' \qquad \text{(D-2.2.1b)}$$

$$\vec{F} = \frac{md^2\vec{s}}{dt^2} = m\vec{s}''. \qquad \text{(D-2.2.1c)}$$

Imajući na umu da je masa tela stalna i da je impuls (količina kretanja) proizvod mase i brzine:

$$\vec{p} = m\vec{\upsilon}$$

iz jednačine (D–2.2.1b) dobijamo još jedan način za izražavanje sile $\vec{F}$:

$$\vec{F} = m\frac{d\vec{\upsilon}}{dt} = \frac{d(m\vec{\upsilon})}{dt} = \frac{d\vec{p}}{dt}. \qquad \text{(D-2.2.1d)}$$

D–2.2.2 Vektori

U desnom ortogonalnom koordinatnom sistemu definisana su tri jedinična vekotra $\vec{i}$, $\vec{j}$ i $\vec{k}$ koji deluju redom u pravcu *x*-, *y*- i *z*-ose. Tada, proizvoljni vektori $\vec{A}$ i $\vec{B}$ mogu da se predstave zbirom njihovih komponenata u pravcima *x*, *y* i *z*:

$$\vec{A} = A_x\vec{i} + A_y\vec{j} + A_z\vec{k}$$

$$\vec{B} = B_x\vec{i} + B_y\vec{j} + B_z\vec{k}.$$

a) Skalarni proizvod dva vektora, $\vec{A}$ i $\vec{B}$, dobija se množenjem komponenata, član po član:

$$\vec{A}\cdot\vec{B} = \vec{A}\vec{B} = (A_x\vec{i} + A_y\vec{j} + A_z\vec{k})\cdot(B_x\vec{i} + B_y\vec{j} + B_z\vec{k})$$

ili s obzirom na to da je posmatrani sistem ortogonalan, tj.:

$$\vec{i}\,\vec{i} = 1, \vec{j}\,\vec{j} = 1, \vec{k}\,\vec{k} = 1, \vec{i}\,\vec{j} = 0, \vec{i}\,\vec{k} = 0, \vec{j}\,\vec{k} = 0$$

$$\vec{A}\cdot\vec{B} = A_xB_x + A_yB_y + A_zB_z = |\vec{A}||\vec{B}|\cos\angle\vec{A},\vec{B} \qquad \text{(D-2.2.2)}$$

(skraćeno, isti uslov može da se iskaže: $\vec{i}\cdot\vec{j} = \delta_{ij}$; $\delta_{ij} = 1$ ako je $i = j$ i $\delta_{ij} = 0$ ako je $i \neq j$). Projekcija vektora na proizvoljno izabrani pravac je skalarni proizvod tog vektora i jediničnog vektora na izabranom pravcu;

b) Vektorski proizvod dva vektora, $\vec{A}$ i $\vec{B}$, nalazimo iz determinante:

$$\vec{A}\times\vec{B} = \begin{bmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{bmatrix} = \begin{matrix} (A_yB_z - A_zB_y)\vec{i} \\ +(A_zB_x - A_xB_z)\vec{j} \\ +(A_xB_y - A_yB_x)\vec{k} \end{matrix} \qquad \text{(D-2.2.3a)}$$

$$|\vec{A}\times\vec{B}| = |\vec{A}||\vec{B}|\sin\angle\vec{A},\vec{B}. \qquad \text{(D-2.2.3b)}$$

Vektorski proizvod je novi vektor, normalan na ravan u kojoj leže početni vektori a čiji je smer određen pravilom desne ruke. Geometrijski, intenzitet vektorskog proizvoda predstavlja površinu romboida čije se ivice poklapaju sa vektorima koji se množe.

Posebni slučajevi:
$\vec{A}, \vec{B}$ paralelni:

$$\sin\angle\vec{A}\vec{B} = 0, \quad \vec{A}\times\vec{B} = 0$$

$\vec{A}, \vec{B}$ normalni:

$$\sin\angle\vec{A}\vec{B} = 1, \quad |\vec{A}\times\vec{B}| = |\vec{A}||\vec{B}|.$$

Primer 1.

$$\vec{A} = A_x\vec{i}, \qquad \vec{B} = B_x\vec{i}, \quad \vec{A}\times\vec{B} = 0.$$

Primer 2.

$$\vec{A} = A_x\vec{i}, \quad \vec{B} = B_y\vec{j}, \quad \vec{A}\times\vec{B} = A_xB_y\vec{k};$$

c) Mešoviti proizvodi tri vektora, $\vec{A}, \vec{B}$ i $\vec{C}$ je skalar:

$$\begin{aligned}\vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C}) &= |\vec{A}|(\vec{B}\times\vec{C})\cos\angle\vec{A},(\vec{B}\times\vec{C}) \\ &= |\vec{A}||\vec{B}||\vec{C}|\cos\angle\vec{A},(\vec{B}\times\vec{C})\sin\angle\vec{B},\vec{C}. \qquad \text{(D-2.2.4a)}\end{aligned}$$

Geometrijski, mešoviti proizvod predstavlja zapreminu paralelopipeda čije se ivice poklapaju sa vektorima koji se množe. Pri tome, vektorski deo proizvoda daje bazu a iz skalarnog se dobija visina paralelopipeda. Iz činjenice da zapremina paralelopipeda ne zavisi od načina na koji se definiše njegova baza, sledi važna, očigledna relacija:

$$\vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C}) = \vec{C}\cdot(\vec{A}\times\vec{B}) = \vec{B}\cdot(\vec{C}\times\vec{A}). \qquad \text{(D-2.2.4b)}$$

Drugim rečima, mešoviti proizvod se ne menja pri kružnim zamenama vektora.

D-2.2.3 Lorencova sila

Na naelektrisanje q koje se kreće brzinom $\vec{\upsilon}$ u električnom polju $\vec{E}$ i magnetnom polju $\vec{B}$, deluje sila $\vec{F}$:

$$\vec{F} = q\vec{E} + q\vec{\upsilon}\times\vec{B}. \qquad \text{(D-2.2.5)}$$

U električnom polju, $\vec{B} = 0$

$$\vec{F} = q\vec{E}.$$

U magnetnom polju:

$$\vec{F} = q\vec{\upsilon} \times \vec{B}, \tag{D-2.2.6a}$$

ili, imajući na umu izraz (D-2.2.1b):

$$\frac{d\vec{\upsilon}}{dt} = \frac{q}{m}\vec{\upsilon} \times \vec{B}. \tag{D-2.2.6b}$$

D-2.2.4 Rešavanje diferencijalne jednačine $d\vec{\beta}/dt = k\vec{\beta} \times \vec{B}$

Vektorska diferencijalna jednačina tipa:

$$\frac{d\vec{\beta}}{dt} = k\vec{\beta} \times \vec{B} \tag{D-2.2.7}$$

javlja se kod problema povezanih s obrtnim kretanjem i sa pojavama u magnetnom polju [jednačina(D-2.2.6b)]. U zavisnosti od problema koji se rešava, vektori $\vec{\beta}$ i $\vec{B}$ i skalar k mogu da imaju različiti fizički smisao. Međutim, postupak za rešavanje jednačine (D-2.2.7) ne zavisi od njenog fizičkog tumačenja. Primenom pravila za vektorski proizvod, izraz (D-2.2.3a), na jednačinu (D-2.2.7) ova se prevodi u odgovarajući sistem skalarnih diferencijalnih jednačina:

$$\begin{aligned} \frac{d\beta_x}{dt} &= k(\beta_y B_z - \beta_z B_y) \\ \frac{d\beta_y}{dt} &= k(\beta_z B_x - \beta_x B_z) \\ \frac{d\beta_z}{dt} &= k(\beta_x B_y - \beta_y B_x). \end{aligned} \tag{D-2.2.8}$$

Rešavanje ovog sistema u opštem slučaju [na primer $\vec{\beta} = \vec{\beta}(x, y, z, t)$ i $\vec{B} = \vec{B}(x, y, z, t)$] predstavlja težak matematički problem. Međutim, u jednostavnijim slučajevima, koji i imaju najveći praktični zanačaj, sistem (D-2.2.8) može lako da se reši bez problema. Razmotrićemo najjednostavniji slučaj kada su intenziteti vektora $\vec{\beta}$ i $\vec{B}$ stalni: $|\vec{\beta}| = const.$, $|\vec{B}| = const.$ Problem može da se dalje pojednostavi izborom pogodnog koordinatnog sistema. Na primer, postavljanjem koordinatnog sistema tako da je z-osa paralelna vektoru $\vec{B}$ dobijamo:

$$B_x = B_y = 0, \qquad B_z = const., \vec{B} = B_z\vec{k},$$

čime se sistem (D-2.2.8) znatno pojednostavljuje:

$$\frac{d\beta_x}{dt} = k\beta_y B_z \tag{D-2.2.9a}$$

$$\frac{d\beta_y}{dt} = -k\beta_x B_z \tag{D-2.2.9b}$$

$$\frac{d\beta_z}{dt} = 0. \qquad \text{(D-2.2.9c)}$$

Poslednja jednačina može da se neposredno integrali, odakle dobijamo:

$$\beta_z = const., = C_3. \qquad \text{(D-2.2.10)}$$

Vrednost konstante C_3 određuje se iz početnih uslova koji se određuju prema prirodi problema koji se razmatra.

Preostale dve jednačine (D-2.2.9a) i (D-2.2.9b) međusobno su spregnute i lako se rešavaju svođenjem na jednu diferencijalnu jednačinu drugog reda. Diferenciranjem (D-2.2.9a) dobijamo:

$$\frac{d^2\beta_x}{dt^2} = kB_z\frac{d\beta_y}{dt}$$

a zamenom izvoda $d\beta_y/dt$ iz (D-2.2.9b):

$$\frac{d^2\beta_x}{dt^2} = -k^2B_z{}^2\beta_x,$$

odnosno:

$$\frac{d^2\beta_x}{dt^2} + k^2B_z{}^2\beta_x = 0. \qquad \text{(D-2.2.11)}$$

Ova diferencijalna jednačina drugog reda rešava se na standardni način. Karakteristična jednačina je:

$$\lambda^2 + k^2B^2 = 0$$

sa rešenjima:

$$\lambda_1 = +ikB_z, \qquad \lambda_2 = -ikB_z \qquad i = \sqrt{-1}$$

a opšte rešenje:

$$\beta_x = a_1e^{\lambda_1 t} + a_2e^{\lambda_2 t}$$

$$= a_1e^{+ikB_z t} + a_2e^{-ikB_z t}$$

$$= a_1\cos(kB_zt) + ia_1\sin(kB_zt) + a_2\cos(kB_zt) - ia_2\sin(kB_zt)$$

$$= (a_1 + a_2)\cos(kB_zt) + i(a_1 - a_2)\sin(kb_zt)$$

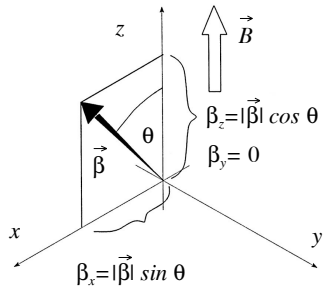
odnosno:

$$\beta_x = C_1\cos(kB_zt) + C_2\sin(kB_zt). \qquad \text{(D-2.2.12)}$$

Koeficijente C_1 i C_2 nalazimo iz početnih uslova kojima se određuje početni položaj vektora $\vec{\beta}$ u prostoru.

Neka je za t=0 vektor $\vec{\beta}$ u xz-ravni, pod uglom θ u odnosu na vektor $\vec{B}$, Slika D-2.2.1 Tada je:

$$\beta_z(0) = |\beta|\cos\theta, \quad \beta_x(0) = |\beta|\sin\theta \quad \text{i} \quad \beta_y(0) = 0 \qquad .$$



Slika D-2.2.1 Početni položaj vektora $\vec{\beta}$ za t=0.

Za komponentu β_x iz jednačine (D-2.2.12), primenom odgovarajućeg početnog uslova $\beta_x(0) = |\vec{\beta}|\sin\theta$, nalazimo:

$$|\vec{\beta}|\sin\theta = C_1\cos(0) + C_2\sin(0)$$

$$C_1 = |\vec{\beta}|\sin\theta$$

i:
$$\beta_x = |\vec{\beta}|\sin\theta\cos(kB_z t) + C_2\sin(kB_z t)\,.$$

Konstantu C_2 nalazimo iz početnih uslova, upoređivanjem izvoda poslednjeg izraza:

$$\frac{d\beta_x}{dt} = -kB_z|\vec{\beta}|\sin\theta\sin(kB_z t) + kB_z C_2\cos(kB_z t)$$

sa jednačinom (D-2.2.9a). Izjednačavanjem desnih strana izraza, nalazimo:

$$\beta_y = -|\vec{\beta}|\sin\theta\sin(kB_z t) + C_2\cos(kB_z t)$$

odakle primenom početnog uslova $\beta_y(0) = 0$, sledi:

$$C_2 = 0\,.$$

Zamenom nađenih vrednosti za konstante, konačno imamo:

$$\beta_x = |\vec{\beta}|\sin\theta\cos(kB_z t) \qquad \text{(D-2.2.13a)}$$

$$\beta_y = -|\vec{\beta}|\sin\theta\sin(kB_z t) \qquad \text{(D-2.2.13b)}$$

i:

$$\beta_z = |\vec{\beta}|\cos\theta\,. \qquad \text{(D-2.2.13c)}$$

Poslednju jednačinu dobili smo unošenjem početnog uslova u izraz (D-2.2.10).

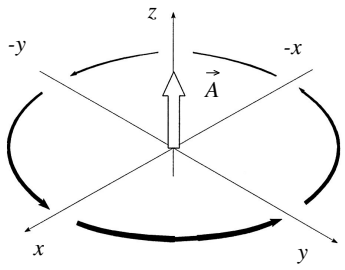
Rešenje za komponentu β_z, je najjednostavnije. S obzirom na to da je β_z stalno, kao i $|\vec{\beta}|$ sledi i da je $\cos\theta$ =*const.*, odnosno da vektor $\vec{\beta}$ tokom vremena ne menja ugao u odnosu na *z*-osu (i na vektor $\vec{B}$).

Kretanje poprečnih komponenata β_x i β_y, najlakše se razume ako uočimo da je:

$$\beta_x^2 + \beta_y^2 = |\vec{\beta}|^2 \sin^2\theta = r^2.$$

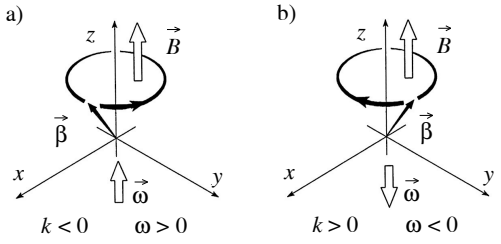
Poslednji izraz predstavlja jednačinu kruga. Komponente β_x i β_y menjaju se tokom vremena ali je zbir njihovih kvadrata stalan. To znači da projekcija vektora $\vec{\beta}$ na *x*, *y*-ravan ima stalan intenzitet krećući se po krugu. S obzirom na sinusnu, odnosno kosinusnu zavisnost komponenata β_y i β_x, vektor $\vec{\beta}$ kruži stalnom frekvencijom oko *z*-ose. Pozitivna rotacija oko *z*-ose odvija se u smeru $x \to y \to -x \to -y \to x$, Slika D-2.2.2. Zbog negativnog znaka sinusnog člana u jednačini (D-2.2.13b), rotacija o kojoj je reč odvija se u smeru $x \to -y \to -x \to y \to x$, tj. rotacija je negativna. Tada je:

$$\omega = -kB_z \,. \qquad \text{(D-2.2.14a)}$$



Slika D-2.2.2 Rotacija se predstavlja vektorom sa osom rotacije čiji se smer u desnom koordinatnom sistemu određuje pravilom desne ruke. Rotacija oko neke ose je pozitivna kada je vektor rotacije paralelan sa smerom te ose. Vektor rotacije može da bude ugao, ugaona brzina, ugaono urbzanje i iz njih izvedeni vektori (ugaoni moment, moment sile, itd.). Na primer, pozitivna rotacija oko *z*-ose odvija se u smeru $x \to y \to -x \to -y \to x$; vektor rotacije $\vec{A}$ paralelan je *z*-osi. Negativna rotacija oko *z*-ose odvija se u suprotnom smeru $x \to -y \to -x \to y \to x$; vektor rotacije $\vec{A}$ tada je antiparalelan *z*-osi.

Smer rotacije zavisi od znaka skalarne konstante koja može da bude pozitivna i negativna, što zavisi od fizičke prirode problema koji se razmatra. Kada je konstnta *k* pozitivna, vektor $\vec{\beta}$ rotira oko vektora $\vec{B}$ po pravilu leve ruke (negativan smer). Ako je rotacija negativna, ide po pravilu desne ruke u odnosu na pozitivni smer vektora $\vec{B}$, Slika D-2.2.3. Kružnu frekvenciju možemo da izrazimo i kao vektor paralelan osi rotacije čiji smer određuje smer rotacije. U vektorskom obliku je:



Slika D-2.2.3 Smer (znak) rotacije koju opisuje sistem jednačina (D-2.2.13) zavisi od predznaka skalarne konstante k: a) za negativno *k* rotacija je pozitivna; vektor kružne frekvencije paralelan je *z*-osi (i magnetnom polju $\vec{B}$); b) za pozitivno *k* rotacija je negativna. Vektor kružne frekvencije je antiparalelan *z*-osi (i magnetnom polju).

$$\vec{\omega} = -k\vec{B}. \qquad \text{(D-2.2.14b)}$$

Znači, pri stalnim vrednostima intenziteta vektora $\vec{\beta}$ i $\vec{B}$ diferencijalnom jednačinom (D-2.2.7) izražava se rotacija vektora $\vec{\beta}$ oko vektora $\vec{B}$ stalnom kružnom frekvencijom koja je proporcionalna intenzitetu vektora $\vec{B}$, a čiji smer zavisi od predznaka skalarne konstante.

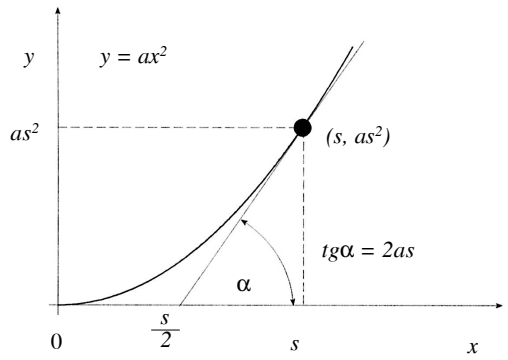
D-2.2.5 Parabola i njena tangenta

Ovde razmatramo geometrijski problem na koji ćemo naići prilikom izračunavanja otklona elektronskog snopa u električnom ili magnetnom polju konačnih dimenzija. Treba da odredimo mesto na kome će tangenta parabole, $y = ax^2$ presecati x-osu. Tangenta parabole je prava koja prolazi kroz izabranu tačku i ima nagib koji je jednak prvom izvodu parabole u toj tački. Jednačina parabole je:

$$y = ax^2$$

a njen prvi izvod:

$$y' = 2ax.$$



Slika D-2.2.4 Prava koja dodiruje parabolu na apscisi, s, preseca apscisnu osu na vrednosti $s/2$.

Vrednost funkcije u izabranoj tački $x = s$ je:

$$y_s = as^2$$

a njenog prvog izvoda:

$$y'_{x=s} = 2as.$$

Jednačina prave koja prolazi kroz tačku (s, y_s) i koja ima nagib $2as$ je:

$$\frac{y - y_s}{x - s} = 2as\,.$$

Presek prave sa x-osom, x_0, dobijamo iz vrednosti x kada je y=0:

$$x_0 = s - \frac{y_s}{2as}\,,$$

ili pošto je y_s tačka zajednička za pravu i parabolu $y_s = as^2$, dobijamo:

$$x_0 = s - \frac{s}{2} = \frac{s}{2}\,. \qquad \text{(D–2.2.15)}$$

Prema tome, tangenta parabole (čije je teme u koordinatnom početku), povučena u proizvoljno izabranoj tački seče x-osu na polovini vrednosti apscise izabrane tačke.

Kada telo koje nije u dodiru sa drugim telom dobija ubrzanje bez vidljivog uzročnika (ili kada na telo treba da se deluje silom da bi se sprečilo njegovo ubrzavanje), tada kažemo da je ono izloženo delovanju **polja sile**. Polja sile sa kojima se najčešće srećemo su gravitaciono, električno i magnetno polje. Poslednja dva mogu da se smatraju i graničnim slučajevima jedinstvenog **elektromagnetnog polja**.

Pošto primena električnog i magnetnog polja predstavlja osnovni način za upravljanje naelektrisanim česticama i ispitivanje njihovih osobina, ukratko ćemo opisati ponašanje naelektrisanih čestica u njima.

2.2.1 Naelektrisana čestica (elektron) u električnom polju

Jačina električnog polja $\vec{E}$ izražava se kao sila po jedinici naelektrisanja koja deluje na malo probno naelektrisanje Δq, postavljeno u polje:

$$\vec{E} = \frac{\vec{F}}{\Delta q}.$$

(Probno naelektrisanje Δq mora da bude malo da ne bi sopstvenim poljem remetilo spoljašnje polje koje se meri.) Otuda, na proizvoljno naelektrisanje q u spoljašnjem električnom polju $\vec{E}$ deluje sila $\vec{F}_E$:

$$\vec{F}_E = q\vec{E}\,. \qquad (2.2.1)$$

Imajući na umu da svaka sila telu čija je masa m, saopštava ubrzanje $\vec{a}$ (D-1.2.2), za slobodno naelektrisanje q čija je masa m, saglasno jednačini (2.2.1) imamo:

$$m\vec{a} = q\vec{E}$$

$$\vec{a} = \frac{q}{m}\vec{E}\,. \qquad (2.2.2)$$

U opštem slučaju, električno polje $\vec{E}$ može da zavisi kako od vremena tako i od prostornih koordinata, pa i ubrzanje $\vec{a}$ zavisi od prostornih i vremenskih koordinata čestice. Međutim, mi ćemo da razmatramo samo slučaj stacionarnih električnih polja, tj. polja koja se ne menjaju tokom vremena i koja imaju jednostavnu zavisnost od prostornih koordinata. Najjednostavniji slučaj je kada polje ne zavisi ni od vremena ni od koordinata, tj. kada je polje konstantno i homogeno. Pri tome, uzimamo da je polje usmereno duž x-ose, $\vec{E} = E_x\vec{i}$. Putanju naelektrisane čestice koja je pri $t = 0$ bila u koordinatnom početku $x(0) = 0$ i u stanju mirovanja $\upsilon_x = 0$, lako nalazimo dvostrukim integraljenjem izraza (2.2.2). Prvim integraljenjem dobijamo brzinu kao funkciju vremena:

$$a_x = \frac{d\upsilon_x}{dt}$$

$$\upsilon_x = \int a_x dt = a_x \int dt = a_x t \tag{2.2.3}$$

$$\upsilon_x = \frac{q}{m} E_x t$$

a drugim, koordinatu (položaj) kao funkciju vremena:

$$x = \int \upsilon_x dt = \frac{q}{m} E_x \int t\, dt$$

$$x = \frac{1}{2}\frac{q}{m} E_x t^2 . \tag{2.2.4}$$

Korišćenjem izraza (2.2.3) i (2.2.4) lako se izračunava kinetička energija T koju čestica dobija kretanjem kroz stalno električno polje:

$$T = \frac{1}{2} m \upsilon_x^2$$

$$= \frac{1}{2} m \left(\frac{q}{m} E_x t \right)^2 \tag{2.2.5}$$

$$= \frac{q^2 E^2 t^2}{2m} .$$

Uklanjanjem vremena t, pomoću izraza (2.2.4), dobijamo:

$$T = xqE_x . \tag{2.2.6}$$

Imajući na umu da je qE_x jednako sili polja koja deluje na česticu, sledi:

$$T = F_x x, \tag{2.2.7}$$

tj. kinetička energija naelektrisane čestice ubrzane poljem E_x, na putu x, jednaka je radu koji je sila polja izvršila pomerajući česticu na tom putu. Pošto je pad potencijala u stalnom polju E_x na putu x jednak proizvodu električnog polja i rastojanja x, $\Delta U = E_x x$, konačno dobijamo:

$$T = q\Delta U. \tag{2.2.8}$$

U atomskoj, nuklearnoj i u fizici čestica, energija se obično izražava u elektronvoltima *e*V, milion elektronvoltima *Me*V, milijardu elektronvoltima *Ge*V, itd. Elektronvolt je energija koju čestica jediničnog naelektrisanja e (e = 1,60 x 10^{-19} C) dobije pri prolasku kroz pad potencijala od 1 V:

$$\begin{aligned} 1eV &= 1e \times 1V \\ &= (1{,}60 \times 10^{-19} C) \times (1V) \\ &= 1{,}60 \times 10^{-19} CV \\ &= 1{,}60 \times 10^{-19} J. \end{aligned} \tag{2.2.9}$$

Po preporuci iz 1998. godine, prihvaćen je odnos:

$$1eV = 1{,}602176462(63) \times 10^{-19} J. \tag{2.2.10}$$

2.2.2 Naelektrisana čestica u magnetnom polju: vektori brzine i polja uzajamno normalni

Posmatrajmo sada naelektrisanu česticu u konstantnom, homogenom magnetnom polju ($\vec{E} = 0, \vec{B} = const.$). Saglasno izrazu (D-2.2.6), sila kojom magnetno polje deluje na česticu je $q\vec{\upsilon} \times \vec{B}$ i jednačina kretanja ima oblik:

$$m\vec{a} = q\vec{\upsilon} \times \vec{B}. \tag{2.2.11}$$

S obzirom na to da se u izrazu pojavljuje vektorski proizvod, ubrzanje $\vec{a}$ uvek je normalno na brzinu $\vec{\upsilon}$ i na pravac magnetnog polja $\vec{B}$. Zbog toga, komponenta brzine paralelna polju $\vec{B}$ ostaje stalna. Za sada ćemo da zanemarimo ovu komponentu brzine uzevši da se kretanje odvija u ravni normalnoj na pravac magnetnog polja $\vec{B}$, kao što je pokazano na Slici 2.2.1. Pošto je ubrzanje (promena brzine) normalno na vektor brzine, veličina (intenzitet) vektora brzine ostaje neizmenjena. Tokom vremena menja se samo njegov pravac, što je odlika ravnomernog kružnog kretanja. Ako je poluprečnik putanje r, centripetalno ubrzanje je υ^2/r, a centripetalna sila $m\upsilon^2/r$. Pošto je ova sila (centripetalna) uzrokovana delovanjem magnetnog polja B na naelektrisanu česticu, mase m i naelektrisanja q, koja se kreće brzinom υ, onda je:

$$\frac{m\upsilon^2}{r} = q\upsilon B \tag{2.2.12}$$

odakle može da se izračuna poluprečnik kružne orbite:

$$r = \frac{m\upsilon}{qB} \tag{2.2.13}$$

i frekvencija kružnog kretanja.

Kako je to uobičajeno, linearnu frekvenciju ν određujemo kao broj krugova koje čestica opiše u jedinici vremena:

$$\nu = \frac{\text{put u jedinici vremena (periferna brzina)}}{\text{put u jednom krugu (obim kruga)}} = \frac{1}{2\pi}\frac{\upsilon}{r} \tag{2.2.14a}$$

a cirkularnu (kružnu) frekvenciju ω kao broj radijana u jedinici vremena:

$$\omega = \frac{\text{put u jedinici vremena (brzina)}}{\text{put po jednom radijanu (radijus kruga)}} = \frac{\upsilon}{r}. \tag{2.2.14b}$$

Očigledno je:

$$\omega = 2\pi\nu.$$

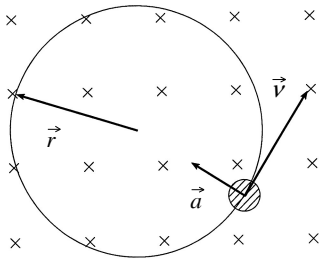
Izračunavajući υ/r iz jednačine (2.2.13), neposredno dobijamo:

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\frac{\upsilon}{r} = \frac{1}{2\pi}\frac{q}{m}B \tag{2.2.14c}$$

i:

$$\omega = \frac{q}{m}B. \tag{2.2.14d}$$

Ova frekvencija, izražena bilo kao linearna ili kao kružna, naziva se **ciklotronska** frekvencija. Treba uočiti da ona zavisi samo od magnetnog polja i od odnosa naelektrisanja i mase čestice. Ciklotronska frekvencija ne zavisi od brzine čestice. (Ovo je tačno samo za nerelativističko kretanje, tj. za $\upsilon \ll c$.)



Slika 2.2.1 Kružna orbita (putanja) pozitivno naelektrisane čestice u homogenom magnetnom polju. Magnetno polje je normalno na ravan crteža, usmereno od posmatrača ka crtežu.

Takođe, naglasimo to da ciklotronska frekvencija ne zavisi od znaka naelektrisanja čestice, a da od znaka naelektrisanja zavisi smer rotacije.

2.2.3 Čestica u homogenom magnetnom polju – opšti slučaj

U opštem slučaju, naelektrisana čestica može da se nađe u kombinovanom električnom i magnetnom polju (elektromagnetnom polju) koje zavisi kako od vremena tako i od položaja (koordinata) čestice. I tada izraz za Lorencovu silu (D-2.2.5), ima isti oblik s tim što su sve promenljive (izuzev naelektrisanja) funkcije vremena t i prostornih koordinata x, y, z:

$$\vec{F}(x, y, z, t) = q\vec{E}(x, y, z, t) + q\vec{\upsilon}(x, y, z, t) \times \vec{B}(x, y, z, t) . \qquad (2.2.15)$$

Ova jednačina najčešće ne može da se reši analitički. Međutim, podešavanjem eksperimentalnih uslova, primenom približnih metoda, korišćenjem računara i sl., ona može uvek da se svede na oblik koji može praktično da se koristi. Zavisnost od vremena može da se ukloni primenom konstatnih polja, a zavisnost od koordinata uklanja se korišćenjem homogenih polja. Na primer, u detektorima elementarnih čestica kao što su maglena ili mehurasta komora, električno polje jednako je nuli $E = 0$, a magnetno polje je konstantno, homogeno, $\vec{B}(x, y, z, t) = \vec{B}_0$, pa se izraz (2.2.15) svodi na oblik:

$$\vec{F}(t) = q\vec{\upsilon}(t) \times \vec{B}_0 . \qquad (2.2.16)$$

Brzina naelektrisane čestice menja se tokom vremena zbog toga što jonizujući sredinu kroz koju prolazi, čestica gubi kinetičku energiju. Analizirajući slike tragova koje naelektrisane čestice ostavljaju u maglenoj ili mehurastoj komori, primenom jednačine (2.2.16) može da se bliže odredi priroda čestice, njeno uzajamno dejstvo sa drugim česticama i sl.

Jednačina (2.2.16) može da se dalje pojednostavi tako što se primenjuje samo na kratki vremenski interval u kojem se brzina čestice neznatno menja, tj. $|\vec{\upsilon}(t)| \approx |\vec{\upsilon}|$ ili tako što se podešavanjem eksperimentalnih uslova ta brzina zaista učini stalnom (na primer, čestica u visokom vakuumu). Tada je:

$$\vec{F}(t) = q\vec{\upsilon}(t) \times \vec{B}_0 ,$$

odnosno:

$$\vec{a} = \frac{q}{m}\vec{\upsilon} \times \vec{B}_0 , \qquad (2.2.17a)$$

$$\frac{d\vec{\upsilon}}{dt} = \frac{q}{m}\vec{\upsilon} \times \vec{B}_0 . \qquad (2.2.17b)$$

Jednačine (2.2.17a) i (2.2.17b) opisuju kretanje naelektrisane čestice čija je masa m, naelektrisanje q i brzina $\vec{\upsilon}$, u konstantnom, homogenom magnetom polju $\vec{B}_0$. Pri

tome početni pravac vektora brzine $\vec{\upsilon}$ ima proizvoljnu orijentaciju u odnosu na pravac magnetnog polja. Rešavanje jednačine ove vrste detaljno je opisano u odeljku D-2.2.4. Rešenja dobijamo neposredno iz (D-2.2.13 a,b,c) ako uočimo odgovarajuću jednoznačnu vezu između veličina koje su korišćene u izrazima (D-2.2.7) i (2.2.17b):

$$\vec{\beta} = \vec{\upsilon}, \qquad k = \frac{q}{m} \text{ i } \vec{B} = \vec{B}_0 .$$

Tada je:

$$\upsilon_x = |\vec{\upsilon}| \sin\theta \ \cos\left(\frac{q}{m} B_z t\right) \tag{2.2.18a}$$

$$\upsilon_y = -|\vec{\upsilon}| \sin\theta \ \sin\left(\frac{q}{m} B_z t\right) \tag{2.2.18b}$$

$$\upsilon_z = |\vec{\upsilon}| \cos\theta . \tag{2.2.18c}$$

Ova posebna rešenja dobijena su za sledeće geometrijske i početne uslove: brzina $\vec{\upsilon}$ zaklapa ugao θ sa vektorom magnetnog polja $\vec{B}$ koji je paralelan sa z-osom; za $t = 0$:

$$\upsilon_x(0) = |\vec{\upsilon}| \sin\theta$$

$$\upsilon_y(0) = 0$$

$$\upsilon_z(0) = |\vec{\upsilon}| \cos\theta .$$

Drugim rečima, u trenutku kada počinjemo da merimo vreme, vektor $\vec{\upsilon}$ nalazi se u xz-ravni, pod uglom θ u odnosu na z-osu i na vektor $\vec{B}$ (koji je paralelan z-osi). Iz rešenja (2.2.18) sledi da vektor brzine $\vec{\upsilon}$ tokom vremena rotira oko vektora polja $\vec{B}$ ugaonom brzinom (frekvencijom) ω, koja je, saglasno izrazu (D-2.2.14a):

$$\omega = -\frac{q}{m} B_z \tag{2.19a}$$

ili u vektorskom obliku:

$$\vec{\omega} = -\frac{q}{m} \vec{B} . \tag{2.2.19b}$$

Zbog negativnog znaka, ako usvojimo da radimo u **desnom** koordinatnom sistemu, negativno naelektrisane čestice imaju pozitivnu frekvenciju, a pozitivno naelektri-

sane negativnu frekvenciju. Pozitivna frekvencija označava da se rotacija odvija po pravilu desne ruke u odnosu na pozitivni pravac z-ose.

Jasniju fizičku sliku o kretanju čestice dobijamo ako umesto brzine posmatramo koordinate čestice. Zavisnost koordinata čestice od vremena (putanju čestice) dobijamo integraljenjem izraza za komponente brzine. S obzirom na jednostavnost izraza (2.2.18), integraljenje se vrši neposredno, odakle dobijamo:

$$x = \frac{|\vec{\upsilon}|}{\omega} \sin\theta \sin\omega t + C_1 \tag{2.2.20a}$$

$$y = \frac{|\vec{\upsilon}|}{\omega} \sin\theta \cos\omega t + C_2 \tag{2.2.20b}$$

$$z = |\vec{\upsilon}| t \cos\theta + C_3 . \tag{2.2.20c}$$

Kao i obično, konstante C_1, C_2 i C_3 zavise od početnih uslova. Ovde biramo početne uslove tako da konstante C_1, C_2 i C_3 budu jednake nuli. To ne menja prirodu putanje već menja samo njen položaj u odnosu na proizvoljno izabran koordinatni početak. Znači, za $t = 0$, $x(0) = 0$, $y(0) = -(|\vec{\upsilon}| \cdot \sin\theta)/\omega$ i $z(0) = 0$ pa je:

$$x = \frac{|\vec{\upsilon}|}{\omega} \sin\theta \sin\omega t \tag{2.2.21a}$$

$$y = \frac{|\vec{\upsilon}|}{\omega} \sin\theta \cos\omega t \tag{2.2.21b}$$

$$z = \upsilon_z^0 t . \tag{2.2.21c}$$

U pravcu z-ose (magnetnog polja) čestica se kreće stalnom brzinom $|\vec{\upsilon}|\cos\theta$, koja zapravo predstavlja početnu vrednost z-komponente brzine.

Oblik putanje u xy-ravni, mada očigledan i iz izraza (2.2.21a,b), najlakše se uočava iz jednostavne jednačine:

$$x^2 + y^2 = \frac{|\vec{\upsilon}|^2}{\omega^2} \sin^2\theta = const .$$

iz koje očigledno sledi da je putanja kružna i da je njen poluprečnik $(\upsilon_0/\omega)\sin\theta$:

$$x^2 + y^2 = r^2 . \tag{2.2.22}$$

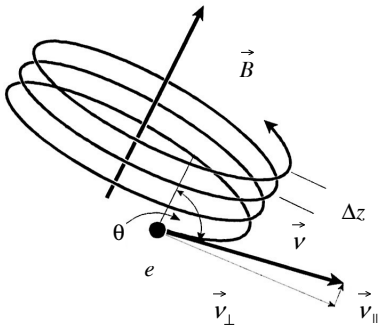
Slaganjem ove dve komponente kretanja (u xy-ravni i u pravcu z-ose) dobijamo da čestica u prostoru opisuje spiralu čiji je poluprečnik:

$$r = \frac{|\vec{\upsilon}|}{\omega} \sin\theta = \frac{m}{q} \frac{|\vec{\upsilon}|}{B_z} \sin\theta \tag{2.2.23}$$

i hod:

$$\Delta z = \frac{|\vec{\upsilon}|}{\nu}\cos\theta = 2\pi\frac{|\vec{\upsilon}|}{\omega}\cos\theta \qquad (2.2.24)$$

kao što je prikazano na Slici 2.2.2. Treba uočiti da se poseban slučaj opisan u odeljku 2.2.2. neposredno dobija iz ovih razmatranja ako se uzme da je $\theta = 90°$. Drugi granični slučaj dobijamo za $\theta = 0$, kada je $x = y = 0$ i $z = |\vec{\upsilon}|t$. Naelektrisana čestica koja uleće paralelno u magnetno polje prolazi kroz polje ne menjajući ni pravac ni brzinu kretanja.



Slika 2.2.2 U konstantnom homogenom magnetnom polju naelektrisana čestica kreće se po spiralnoj putanji, čija je osa paralelna sa pravcem polja i čiji hod i poluprečnik zavise od ugla između vektora $\vec{B}$ i $\vec{\upsilon}$, kao i od njihovih intenziteta.

U opštem slučaju, bez obzira na izbor koordinatnog sistema, kada su početna brzina nalektrisane čestice $\vec{\upsilon}$ i vektor spoljašnjeg magnetnog polja $\vec{B}$ pod proizvoljnim uglom, čestica se kreće po spirali čija je osa paralelna vektoru polja $\vec{B}$.

2.2.4 Elektron u električnom polju konačnih dimenzija

Na osnovu kretanja naelektrisanja u električnom i magnetnom polju može da se bliže odredi priroda čestice ili vrsta interakcije u kojoj ona učestvuje. Istorijski gledano, prvi takvi eksperimenti rađeni su sa elektronima. Na osnovu kretanja elektrona u električnom i magnetnom polju, J. J. Tomson je odredio odnos *e/m* iz kojeg se, znajući naelektrisanje *e*, može odrediti i prava masa elektrona *m*. Pošto se za ove oglede koriste polja konačnih dimenzija (konačnih u odnosu na putanju elektrona), razmotrićemo kretanje elektrona pod tim uslovima.

Posmatrajmo najjednostavniji slučaj. Elektron se kreće brzinom υ_xu pravcu *x*-ose. Na putu dužine s_E deluje električno polje $\vec{E}$ duž negativnog pravca *y*-ose. Uticaj električnog polja na elektron beleži se praćenjem njegovog položaja na fluorescentnom zastoru koji se nalazi na rastojanju *l* od izabranog koordinatnog početka, Slika 2.2.3:

$$\vec{E} = -E_y\vec{j}, \qquad q = -e \qquad (2.2.25)$$

$$\vec{F} = m\vec{a} = q\vec{E} \qquad (2.2.26a)$$

ili u našem slučaju:

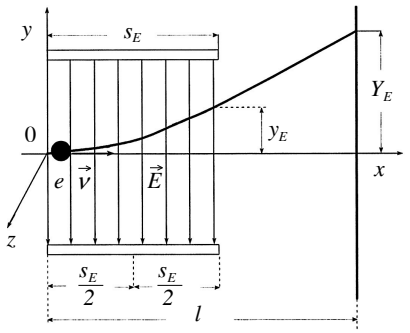
$$F_y\vec{j} = ma_y\vec{j} = eE_y\vec{j}. \tag{2.2.26b}$$

Odavde dobijamo izraz za ubrzanje koje električno polje saopštava elektronu:

$$a_y = \frac{e}{m}E_y. \tag{2.2.27a}$$

Pošto je *y*-koordinata elektrona jedini parametar koji (posredno) možemo da odredimo, potrebno je da se ubrzanje a_y izrazi preko koordinate *y:*

$$a_y = \frac{d\upsilon_y}{dt} = \frac{d^2y}{dt^2} \tag{2.2.27b}$$



Slika 2.2.3 Kretanje elektrona u homogenom električnom polju. Elektron se prvobitno kretao u smeru *x*-ose. Polje deluje u pravcu *y*-ose (u negativnom smeru), u oblasti od 0 do S_E. Posle napuštanja polja, elektron se kreće pravolinijski do ekrana koji je na rastojanju *l* od koordinatnog početka.

pa je:

$$\frac{d^2y}{dt^2} = \frac{e}{m}E_y. \tag{2.2.28}$$

Odavde se dvostrukim integraljenjem dobija skretanje elektrona, *y*, pod uticajem električnog polja, $E_y\vec{j}$, koje deluje u vremenu *t*:

$$\int d\left[\frac{dy}{dt}\right] = \int \frac{e}{m}Edt + C_1$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{e}{m}Et + C_1$$

(2.2.29a)

$$\int dy = \int \left[\frac{e}{m}Et + C_1\right]dt + C_2$$

$$y = \frac{e}{m}E\frac{t^2}{2} + C_1 t + C_2 .$$

Konstante integraljenja C_1 i C_2 određujemo iz početnih uslova. U trenutku $t = 0$ elektron ima y-koordinatu nula, $y_{t=0} = 0$, kao i brzinu u pravcu y ose, $\{d(y)/dt\}_{t=0} = 0$, te je i $C_1 = C_2 = 0$:

$$y = \frac{e}{m}E\frac{t^2}{2} . \qquad (2.2.29b)$$

Ovde se t odnosi na vreme t_E koje elektron provede u električnom polju. Pošto polje deluje na putu s_E koji elektron prevali krećući se stalnom brzinom υ_x u vremenu t_E, to je:

$$t_E = \frac{s_E}{\upsilon_x} \qquad (2.2.30)$$

odakle konačno dobijamo izraz za skretanje elektrona neposredno po izlasku iz električnog polja:

$$y_E = \frac{eEs_E^2}{2m\upsilon_x^2} . \qquad (2.2.31)$$

Međutim, nas zanima koliko je skretanje elektrona na fluorescentnom zaklonu, Y_E, pošto je to veličina koju možemo da merimo. S obzirom na to da po izlasku iz kondenzatora na elektron ne deluje više nikakva sila, on se od s_E do l kreće pravolinijski (po tangenti parabole u toj tački). Pošto [saglasno izrazu (D-2.2.7)] tangenta parabole u tački s_E seče x-osu u vrednosti $s_E/2$, iz podudarnosti trouglova očigledno je $(s_E/2)/(l - s_E/2) = y_E/Y_E$. Tako dobijamo izraz za skretanje elektrona na fluorescentnom ekranu Y_E u zavisnosti od osobina samog elektrona (e/m) i parametara uređaja u kojem se skretanje meri, E_y, s_E, l, υ_x:

$$Y_E = \frac{y_E\left(l - \frac{s_E}{2}\right)}{\frac{s_E}{2}} = \frac{e}{m}\frac{E\left(l - \frac{s_E}{2}\right)s_E}{\upsilon_x^2} . \qquad (2.2.32)$$

Iz ove jednačine dobijamo izraz za odnos naelektrisanja i mase elektrona, tj. specifično naelektrisanje:

$$\frac{e}{m} = \frac{\upsilon_x^2\, Y_E}{E\left(l - \frac{s_E}{2}\right) s_E}. \tag{2.2.33}$$

2.2.5 Elektron u magnetnom polju konačnih dimenzija

Za razmatranje kretanja elektrona u magnetnom polju posmatraćemo situaciju sličnu prethodnoj. Elektron se kreće u pravcu x-ose brzinom υ_x. U zoni dužine s_B na njega deluje konstantno, homogeno, magnetno polje $\vec{B}$. Zbog toga elektron skreće u pravcu y-ose, što se registruje posmatanjem traga na fluorescentnom zastoru koji se nalazi na rastojanju l, Slika 2.2.4. Podrazumeva se da se u trenutku $t = 0$ elektron nalazi u koordinatnom početku i da se kreće samo u pravcu x-ose:

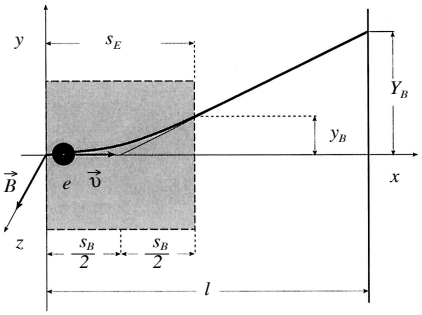
$$q = -e, \quad \vec{\upsilon} = \upsilon_x \vec{i}, \quad \vec{B} = B_z \vec{k}, \quad y_{t=0} = 0, \quad \left[\frac{dy}{dt}\right]_{t=0} = 0.$$

Iz izraza (D-2.2.6a):

$$\vec{F} = -e\vec{\upsilon} \times \vec{B} \tag{2.2.34a}$$

dobijamo:

$$\vec{F} = -e(-\upsilon_x B_z)\vec{j} = e\upsilon_x B_z \vec{j} \tag{2.2.34b}$$



Slika 2.2.4 Kretanje elektrona u homogenom magnetnom polju. Elektron se prvobitno kretao paralelno x-osi. Magnetno polje deluje u smeru z-ose, koja je normalna na ravan crteža, u području od 0 do s_B. Po izlasku iz polja elektron se kreće ka zaklonu pravolinijski, po tangenti putanje koju je imao u tački $x=s_B$.

ili u sklaranom obliku:

$$F_y = e\upsilon_x B_z . \tag{2.2.34c}$$

Postupajući kao u prethodnom slučaju, $F_y = ma_y$, $a_y = d^2y/dt^2$, dobijamo:

$$\frac{d\left[\frac{dy}{dt}\right]}{dt} = e\upsilon_x B_z , \tag{2.2.35}$$

a posle dvostrukog integraljenja uz navedene početne uslove:

$$y_B = \frac{e}{m}\frac{\upsilon_x B_z t_B^2}{2} . \tag{2.2.36}$$

Vreme t_B, dobijamo iz uslova da se elektron kreće stalnom brzinom υ_x i da u tom vremenu prevali put s_B, $t_B = s_B/\upsilon_x$. Vezu između otklona na fluorescentnom zaklonu y_B, i osobina elektrona koje tražimo, nalazimo iz toga što znamo da se elektron posle napuštanja područja s_B (u kojem deluje magnetno polje) kreće pravolinijski (po tangenti prvobitne parabolične putanje). Pošto tangenta parabole povučena u tački s_B seče x-osu u tački $s_B/2$ (odeljak D-2.2.5), sa Slike 2.2.4 nalazimo da je:

$$\frac{Y_B}{y_B} = \frac{l - \frac{s_B}{2}}{\frac{s_B}{2}}$$

što zamenom u (2.2.36) daje:

$$Y_B = \frac{y_B\left(l - \frac{s_B}{2}\right)}{\frac{s_B}{2}} = \frac{e}{m}\frac{B_z s_B\left(l - \frac{s_B}{2}\right)}{\upsilon_x} . \tag{2.2.37}$$

I iz ovog izraza specifično naelektrisanje elektrona e/m može da se izrazi preko parametara uređaja i veličina koje mogu da se mere nezavisno. Međutim, određivanje brzine kretanja elektrona υ_x nije uvek jednostavno, pa je najlakše da se određivanje specifičnog naelektrisanja izvede posmatranjem kretanja elektrona u kombinovanom električnom i magnetnom polju.

2.2.6 Elektron u kombinovanom električnom i magnetnom polju konačnih dimenzija – normalna polja

Posmatraćemo najjednostavniji slučaj kada su električno i magnetno polje uzajamno normalni i kada se elektron kreće u pravcu normalnom na delovanje oba polja. Situacija je istovetna sa prethodno opisanim eksperimentima, s tom razlikom

što električno polje deluje u pravcu *y*-ose izazivajući skretanje elektrona u suprotnom smeru od skretanja prouzrokovanog magnetnim poljem, Slika 2.2.5. Tada se prvo odredi skretanje elektrona u jednom od polja, na primer u magnetnom Y_B, a zatim se to skretanje poništi delovanjem električnog polja. Tada je:

$$Y_B = Y_E \tag{2.2.38}$$

odakle se izjednačavanjem izraza (2.2.32) i (2.2.37) dobija:

$$\upsilon_x = \frac{E_y s_E \left(l - \frac{s_E}{2} \right)}{B_z s_B \left(l - \frac{s_B}{2} \right)} . \tag{2.2.39}$$

Zamenom ovog izraza u jednačinu (2.2.32) ili (2.2.37) (svejedno koju, pošto su skretanja ista) dobija se:

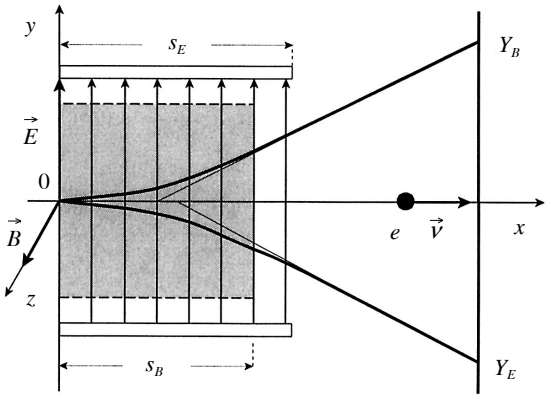
$$\frac{e}{m} = \frac{2 E_y Y_{E,B} s_E \left(l - \frac{s_E}{2} \right)}{B_z^2 \, s_B^2 \left(l - \frac{s_B}{2} \right)^2} \qquad \left(\frac{C}{kg} \right) \tag{2.2.40}$$

$$\frac{e}{m} = 1{,}76 \times 10^{11} \qquad \frac{C}{kg} . \tag{2.2.41}$$

Znajući da je naelektrisanje elektrona $e = 1{,}60 \times 10^{-19}$ C, možemo da izračunamo apsolutnu masu elektrona:

$$m = 9{,}1 \times 10^{-31} \; kg . \tag{2.2.42}$$

Raspodela elektrona (ili u opštem slučaju naelektrisanih čestica) po brzinama predstavlja ozbiljan problem prilikom određivanja odnosa *q/m* primenom normalnih polja. Ovaj problem naročito je izražen kod pozitivnih jona koji još u elementarnom činu nastanka imaju značajnu kinetičku energiju. Ta raspodela energija ne menja se bitno ni posle primene električnog polja kojim se stvara jonski snop. Zbog toga, snopovi naelektrisanih čestica, ako se ne preduzimaju posebne mere da se to izbegne, sadrže čestice različitih brzina i energija. Iz izraza (2.2.39) vidi se da za datu kombinaciju polja E_y i B_z postoji samo jedna brzina pri kojoj će skretanje u električnom biti nadoknađeno skretanjem u magnetnom polju. Čestice koje imaju različite brzine od brzine koja je određena jednačinom (2.2.39), napraviće mali otklon naviše ili naniže, zbog čega će na ekranu, umesto dobro određene svetle tačke, da se pojavi vertikalna razmazana mrlja. Naravno, njen položaj ne može dobro da se odredi, pa otuda ni da se izmeri.



Slika 2.2.5 Kretanje elektrona u kombinovanom električnom i magnetnom polju. Magnetno polje deluje kao na Slici 2.2.4. Električno polje deluje u smeru *y*-ose. Pošto dva polja izazivaju skretanje elektrona u suprotnim smerovima, može da se podesi da se ta dva uticaja potpuno poništavaju, tako da elektron stiže na ekran bez skretanja.

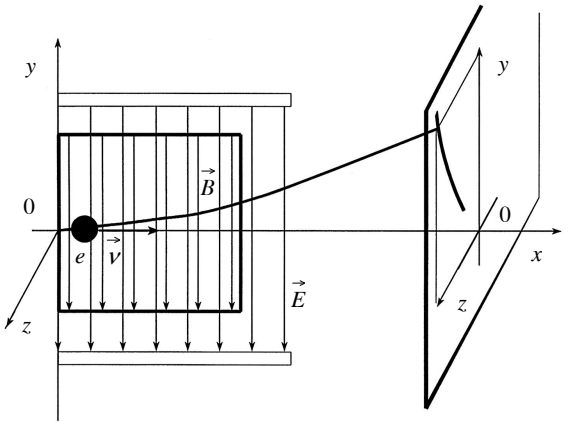
Postoji više metoda da se odnos *q/m* za naelektrisane čestice tačno odredi uprkos raspodeli čestice po brzinama od kojih ćemo ukratko da opišemo samo dve. U prvoj metodi, propuštanjem upadnog snopa čestica kroz filter brzina u uređaju za merenje odnosa *q/m*, prolaze samo čestice koje imaju odabranu brzinu i na njih može da se u potpunosti primeni postupak opisan u ovom odeljku. Kombinacija uzajamno normalnog električnog i magnetnog polja, za koju važi izraz (2.2.39), predstavlja najjednostavniji filter brzina. Ako su polja ujednačena i ako deluju u istom području ($S_E = S_B$), tada kroz njih bez skretanja prolaze samo čestice koje, saglasno jednačini (2.2.39), imaju brzinu određenu odnosom:

$$\upsilon_f = \frac{E}{B}. \tag{2.2.43}$$

Stavljanjem zaklona sa malim otvorom iza polja *E* i *B*, neskrenute čestice (one sa brzinom υf) prolaze u uređaj za određivanje odnosa *q/m*, a one koje skreću (sa drugim brzinama) zadržava zaklon. Ozbiljan nedostatak ove metode je to što najveći deo upadnog fluksa ostaje neiskorišćen, pa joj to znatno smanjuje osetljivost.

2.2.7 Elektron u kombinovanom električnom i magnetnom polju konačnih dimenzija – paralelna polja

Druga metoda za merenje odnosa *q/m* kod čestica koje podležu nekoj raspodeli brzina zasniva se na primeni paralelnog električnog i magnetnog polja. Metoda u potpunosti odgovara onoj opisanoj u prethodnom odeljku, s tom razlikom što je magnetno polje zarotirano za 90° pa deluje paralelno sa električnim poljem, Slika 2.2.6. Tada se skretanje u električnom polju odvija kao i ranije, duž *y*-ose, a u magnetnom, zbog rotacije polja, duž *z*-ose. Uzimajući da su svi geometrijski uslovi isti kao i ranije (uzevši u obzir da zbog rotacije magnetnog polja iz B_z u $-B_y$ otklon Y_B prelazi u Z_B), iz izraza (2.2.32) i (2.2.37) dobijamo:



Slika 2.2.6 Kretanje elektrona u kombinovanom električnom i magnetnom polju. Oba polja, i električno i magnetno, deluju suprotno smeru *y*-ose. Pošto električno polje izaziva skretanje snopa po *y*-osi, a magnetno polje po *z*-osi, elektronski snop će skrenuti u *yz*-ravan. Kako veličina otklona u oba pravca zavisi od brzina čestica i to po *y*-osi od υ^2, a po *z*-osi od υ, to će snop da se raspr̀i u *yz*-ravni obrazujući parabolu.

$$Y_E = y = \frac{e}{m}\frac{E_y\left(l-\frac{s_E}{2}\right)s_E}{\upsilon_x^2} \tag{2.2.44}$$

$$Z_B = z = \frac{e}{m}\frac{B_y\left(l-\frac{s_B}{2}\right)s_B}{\upsilon_x}. \tag{2.2.45}$$

Za razliku od ranije opisivanih slučajeva, ovde je brzina υ_x promenljiva (zbog postojanja raspodele), pa ove jednačine predstavljaju par parameterskih jednačina. Zajednički parametar υ_x može da se ukloni, pa otklon snopa po *y*-osi može da se izrazi kao funkcija otklona po *z*-osi:

$$y = \frac{m}{e}\frac{E_y\left(l-\frac{s_E}{2}\right)s_E}{\left[B_y\left(l-\frac{s_B}{2}\right)s_B\right]^2}z^2. \tag{2.2.46}$$

Otklon *y* proporcionalan je kvadratu otklona *z*, dakle, predstavlja parabolu čiji koeficijent zavisi kako od osobina čestice (*e/m*) tako i od parametara uređaja *E, B, s*. Zamenom parametara uređaja jedinstvenom konstantom:

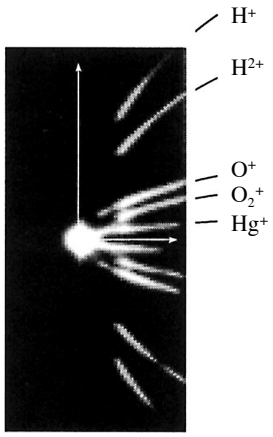
$$k = \frac{E_y\left(l-\frac{s_E}{2}\right)s_E}{\left[B_y\left(l-\frac{s_B}{2}\right)\right]^2} \tag{2.2.47}$$

dobijamo da je:

$$y = \frac{k}{\left(\frac{e}{m}\right)} z^2 . \tag{2.2.48}$$

To znači da otklon elektrona (ili drugih naelektrisanih čestica) u paralelnom magnetnom i električnom polju opisuje parabolu čiji koeficijent, u datom uređaju, zavisi samo od odnosa *q/m* naelektrisanih čestica.

Ako snop sadrži čestice sa različitim odnosima *q/m* (na primer, jonski snop smeša), tada odnos *q/m* može da se odredi za sve prisutne jonske vrste istovremeno, što predstavlja osnovu savremene masene spektrometrije, Slika 2.2.7.



Slika 2.2.7 Parabole pozitivnih jona koje je dobio J. J. Tomson u kombinovanom paralelnom električnom i magnetnom polju. Jonske vrste su identifikovane iz veličine skretanja. Da bi se bolje odredili parametri parabola, magnetno polje je invertovano u toku snimanja. Zbog toga su parabole simetrične u odnosu na *y*-osu. Središnja mrlja u koordinatnom početku potiče od jona koji su na zaklon prispeli pre uključivanja polja.

Prvi maseni spektrometar načinio je J. J. Tomson 1913. godine upravo primenom paralelnih polja.

2.2 Zadaci

Z-2.2.1 Elektron čija je energija 100 *e*V ulazi u homogeno električno polje koje je paralelno pravcu kretanja elektrona. Ako je jačina polja 2000 N/C (Njutna po kulonu), koliki će put da pređe elektron pre nego što se sasvim zaustavi?

[5,0 cm]

Z-2.2.2 Elektron sa kinetičkom energijom od 1 *keV* uleće u magnetno polje čija je indukcija 10^{-3}T. Izračunati poluprečnik putanje i vreme potrebno elektronu da opiše pun krug ako u polje uleće pod uglom:

a) 90°,

b) 30°.

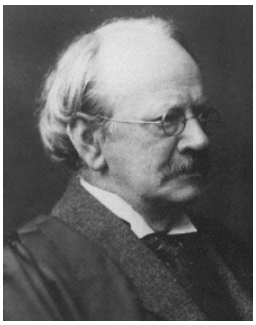
[$T = 3{,}58 \times 10^{-8}$s; a) r = 10,6 cm; b) 5,32 cm]

Z-2.2.3 Izračunati poluprečnik putanje:

a) elektrona,

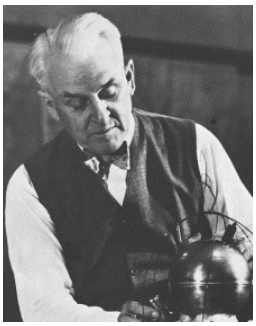
b) protona koji sa kinetičkom energijom od 300 *eV* uleću u magnetno polje čija je indukcija 5,0 mT, pod uglom od 30°.

[r_{el} = 0,57 cm; r_{pr} = 24,4 cm]



Ser Džozef Džon Tomson (Sir Joseph John Thomson, 1856–1940), rođen je u Mančesteru, a školovao se u Ovensovom koledžu u Mančesteru i u Triniti koledžu u Kembridžu. Od 1905. do 1918. bio je predavač Kraljevskog instituta. Tomson je otkrio elektron i tako postao prvi istraživač koji se bavio fizikom elementarnih čestica. Nobelovu nagradu za fiziku dobio je 1906. godine za teorijska i eksperimentalna istraživanja provođenja elektriciteta kroz gasove.

Robert Endrjus Miliken (Robert Andrews Milikan, 1868–1953), rođen je u Morisonu (Ilinois, SAD), pohađao je Oberlinski koledž i doktorirao 1895. na Kolumbija univerzitetu. Od 1921. do 1945. rukovodio je fizičkom laboratorijom Kalifornijskog tehnološkog instituta (Caltech). U prvim istraživanjima bavio se rendgenskim zračenjem i slobodnim širenjem gasova. Godine 1910. odredio je naelektrisanje elektrona. Takođe, veoma je poznat njegov rad na eksperimentalnoj potvrdi fotoelektričnog efekta. Godine 1923. dobio je Nobelovu nagradu za određivanje elementarnog naelektrisanja i za istraživanje fotoelektričnog efekta.



3. KVANT DEJSTVA

3.1 ZRAČENJE CRNOG TELA

D-3.1 Jednačina ravnog talasa

Razmotrimo talase koji se prostiru duž neke prave linije, na primer, žice čiji se jedan kraj održava u stanju oscilovanja. Označićemo sa s rastojanje (elongaciju) tačke žice od njenog ravnotežnog položaja. Talasni proces će biti definisan ako se zna vrednost s u svakom trenutku vremena t, za sve vrednosti položaja x duž pravca prostiranja talasa. Neka se talasni proces odlikuje kružnom frekvencijom ω i amplitudom a (najveće rastojanje od ravnotežnog položaja). Bitna karakteristika talasa je i talasna dužina λ koja predstavlja najmanje rastojanje duž x-ose između dve tačke (A i B na Slici D-3.1.1) koje osciluju u istoj fazi. Pored zavisnosti veličine pomeranja s od položaja x u datom trenutku, talasni proces odlikuje se i zavisnošću u od vremena t. Ako se oscilacije u tački A izvode po zakonu:

$$s = a \cos \omega t \tag{D-3.1.1}$$

pri čemu t predstavlja vreme od početka oscilovanja, tada će oscilacije koje se šire od tačke A doći do neke tačke A' na rastojanju x za vreme $\tau = x/\upsilon_f$, gde je υ_f tzv. fazna brzina talasa. Fazna brzina talasa povezuje talasnu dužinu λ s periodom oscilovanja T, vremenom posle kojeg se u posmatranoj tački ponovo uspostavlja ista faza oscilovanja:

$$\upsilon_f = \frac{\lambda}{T}. \tag{D-3.1.2}$$

Oscilacije u tački A' vrše se po zakonu:

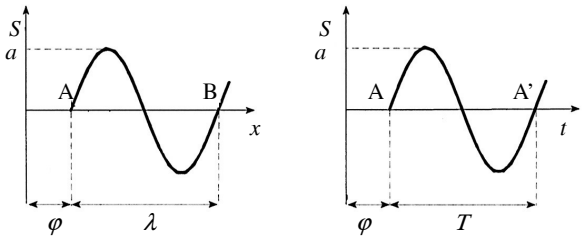
$$s = a \cos \omega t' \tag{D-3.1.3}$$

pri čemu pretpostavljamo da se oscilacije ne prigušuju, tj. da je amplituda a stalna. U trenutku t' tačka A' je u istoj fazi oscilovanja kao tačka A u trenutku t, tako da možemo t' u jednačini (D-3.1.3) da zamenimo sa $t - \tau$, odnosno sa $t - x/\upsilon_f$:

$$s = a \cos \omega\left(t - \frac{x}{\upsilon_f}\right). \tag{D-3.1.4}$$

Ukoliko postoji neka početna faza φ kao na Slici D-3.1.1, tada ravni monohromatski talas prikazujemo izrazom:

$$s = a\,\cos\left[\omega\left(t-\frac{x}{\upsilon_f}\right)+\varphi\right]. \qquad \text{(D-3.1.5)}$$



Slika D-3.1.1 Uz jednačinu ravnog talasa.

Površina čije sve tačke imaju istu vrednost faze naziva se ekvifazna površina. U posmatranom slučaju ekvifazna površina je ravan:

$$x = const.$$

a normala na ovu površinu poklapa se sa *x*-osom. Iz uslova konstantnosti faze:

$$t-\frac{x}{\upsilon_f} = const. \quad \Rightarrow \quad x = \upsilon_f t + const.$$

sledi da fazna brzina označava brzinu pomeranja ekvifazne ravni. Funkcija *s* odlikuje se vremenskom i prostornom periodičnošću. Na osnovu vremenske periodičnosti proizlazi da posle konstantnog perioda vremena *T* mora da bude zadovoljena sledeća jednakost:

$$a\,\cos\left[\omega\left(t-\frac{x}{\upsilon_f}\right)+\varphi\right] = a\,\cos\left[\omega\left(t+T-\frac{x}{\upsilon_f}\right)+\varphi\right]$$

što je ispunjeno za:

$$\omega T = 2\pi \quad \Rightarrow \quad \omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu$$

gde je ν linijska učestanost. Zbog prostorne periodičnosti sledi da se, u datom trenutku *t*, pri promeni koordinate *x* za λ (talasna dužina), vrednost funkcije *s* ne menja, što izražavamo jednakošću:

$$a\,\cos\left[\omega\left(t-\frac{x}{\upsilon_f}\right)+\varphi\right] = a\,\cos\left[\omega\left(t-\frac{x+\lambda}{\upsilon_f}\right)+\varphi\right]$$

odnosno:

$$\frac{\omega\lambda}{\upsilon_f} = 2\pi \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{2\pi\upsilon_f}{\omega} = \frac{\upsilon_f}{\nu}$$

ili:

$$\upsilon_f = \lambda\nu$$

a to je jednačina koja povezuje faznu brzinu i talasnu dužinu.

Posmatrajmo sada opštiji slučaj. Neka se naš talas prostire u pravcu x', koji s koordinatnim osama x, y, i z redom zaklapa uglove α, β i γ. Ovo je istovremeno i pravac normale na ekvifaznu ravan, dok jednačina ekvifazne ravni u ovom slučaju glasi:

$$x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma = const.$$

Talasni vektor[6] koji je po definiciji usmeren duž pozitivne normale na ekvifaznu ravan, predstavićemo u obliku:

$$\vec{k} = k_x\vec{i} + k_y\vec{j} + k_z\vec{k}$$

dok je intenzitet talasnog vektora:

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad \text{(D-3.1.6)}$$

odakle se dobijaju sledeće veze:

$$\cos\alpha = \frac{k_x}{2\pi}\lambda \; ; \quad \cos\beta = \frac{k_y}{2\pi}\lambda \; ; \quad \cos\gamma = \frac{k_z}{2\pi}\lambda. \qquad \text{(D-3.1.7)}$$

Kako posmatramo prostiranje talasa duž x-koordinate, to jednačina (D-3.1.5) sada ima sledeći oblik:

$$s = a\cos\left[\omega\left(t - \frac{x'}{\upsilon_f}\right) + \varphi\right]. \qquad \text{(D-3.1.8)}$$

Veza između x'- koordinate i koordinata x, y i z izračunava se iz proste geometrijske slike i ima oblik:

$$x' = x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma$$

pa se, zamenjivanjem ove jednakosti u (D-3.1.8) i uz $\upsilon_f = \lambda\nu$, dobija:

$$s = a\cos\left[\omega\left(t - \frac{x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma}{\lambda\nu}\right) + \varphi\right] = \qquad \text{(D-3.1.9)}$$

[6] Talasni vektor se prema usvojenim konvencijama označava simbolom k kojim se, takođe, označava i jedinični vektor duž x-ose što, nažalost, može izazvati zabunu.

$$= a \cos\left[\omega t - \frac{2\pi}{\lambda}(x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma) + \varphi\right].$$

Kako su na osnovu jednačine (D-3.1.6) komponente talasnog vektora:

$$k_x = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\alpha \; ; \quad k_y = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\beta \; ; \quad k_z = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\gamma$$

sledi:

$$\frac{2\pi}{\lambda}(x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma) = xk_x + yk_y + zk_z = \vec{k}\cdot\vec{r} \qquad \text{(D-3.1.10)}$$

gde je $\vec{r}$ radijus vektor bilo koje tačke na ekvifaznoj površini. Na osnovu jednačine (D-3.1.10) izraz (D-3.1.9) može da se napiše u obliku:

$$s = a\cos(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r} + \varphi). \qquad \text{(D-3.1.11)}$$

Jednačina ravnog talasa može da se napiše kako u trigonometrijskom obliku [jednačine (D-3.1.8), odnosno (D-3.1.11)], tako i u kompleksnom obliku:

$$s = ae^{i[\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r} + \varphi]} = a\cdot e^{i\varphi}\cdot e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \qquad \text{(D-3.1.12)}$$

ili ako se uvede kompleksna amplituda:

$$A = a\cdot e^{i\varphi}$$

$$s = A\, e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}. \qquad \text{(D-3.1.13)}$$

Napomenimo da jednačine ravnog talasa [(D-3.1.11) i (D-3.1.13)] predstavljaju partikularna rešenja parcijalne diferencijalne jednačine drugog reda, talasne jednačine. Naime, iz osnovnih jednačina elektromagnetnog polja u vakuumu – iz Maksvelovih jednačina može da se pokaže da jačine električnog i magnetnog polja van izvora poremećaja, zadovoljavaju diferencijalnu jednačinu istog oblika, pa se ponašaju na isti način kako u prostoru tako i u vremenu. U sredini koja nije provodna ova diferencijalna jednačina (talasna jednačina) ima oblik:

$$\frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 s}{\partial t^2} \qquad \text{(D-3.1.14)}$$

s ovde predstavlja komponentu jačine električnog ili magnetnog polja. Lako može da se pokaže da jednačine ravnog talasa, jednačine (D-3.1.12) i (D-3.1.13), zadovoljavaju diferencijalnu jednačinu (D-3.1.14) odnosno predstavljaju njena partikularna rešenja.

Krajem 19. veka bilo je dobro poznato da zagrejana čvrsta tela emituju elektromagnetno zračenje u kojem su zastupljene sve talasne dužine (odnosno frekvencije) ali s različiitm intenzitetom. Kao što emituju, čvrsta tela mogu i da apsorbuju zračenje koje se odlikuje određenom spektralnom raspodelom karakterističnom za

određenu temperaturu. Telo apsorpcijom dobija, a emisijom gubi energiju. Sistem koji od okoline prima energiju koja upravo kompenzuje gubitak energije usled zračenja nalazi se u ravnoteži i pripisujemo mu neku temperaturu T. Ukoliko je energija koju telo dobija spolja nedovoljna za potpunu kompenzaciju energije izgubljene zračenjem, dolazi do smanjenja unutrašnje energije tela, zbog čega se narušava ravnoteža. Kad je gubitak energije izgubljene zračenjem mali u odnosu na ukupnu energiju, temperatura tela opada relativno sporo, pa se uprkos njenoj promeni može smatrati da je zračenje ravnotežno i u skladu s trenutnom temperaturom T.

U nauci se obično umesto razmatranja složenog, stvarnog sistema posmatra pretpostavljeni, uprošćeni model. U fizičkoj hemiji je, na primer, poznat koncept idealnog gasa na osnovu čega se izvodi jednačina idealnog gasnog stanja koja samo približno opisuje ponašanje realnog gasa koji se tek na visokoj temperaturi i na niskom pritisku ponaša kao idealni. Tako se i teorijska razmatranja svih pojava vezanih za zračenje tela na određenim temperaturama odnose na ravnotežno zračenje i izvode na modelu *crnog tela*. Crno telo se definiše kao telo koje potpuno apsorbuje upadno zračenje, nezavisno od talasne dužine. Objasnimo ovo detaljnije.

Neka na telo pada, po jedinici površine u jedinici vremena i u okolini neke talasne dužine λ, gustina fluksa energije Φ_λ:

$$\Phi_\lambda St = \frac{dE}{d\lambda} \tag{3.1.1}$$

pri čemu je E energija, S površina, t vreme, a λ talasna dužina. Neko realno telo delimično apsorbuje, a delimično reflektuje upadno zračenje. Tada se apsorbovana gustina fluksa Φ_λ' definiše kao apsorbovna energija oko talasne dužine λ po jedinici površine tela u jedinici vremena. Odnos apsorbovane i upadne gustine fluksa, predstavlja sposobnost tela da apsorbuje zračenje date talasne dužina λ, označava se sa A_λ a naziva se spektralna apsorpcija:

$$A_\lambda = \frac{\Phi_\lambda'}{\Phi_\lambda} \tag{3.1.2}$$

A_λ je neimenovani broj koji za realna tela zavisi od talasne dužine i uvek je manji od jedinice. Crno telo apsorbuje u potpunosti celokupno zračenje koje padne na njega, pa je u tom slučaju $A_\lambda = 1$ za svako λ.

Spektralna emisiona sposobnost – ekscitancija M_λ definiše se kao energija koju telo emituje sa jedinice površine u jedinici vremena u okolini neke talasne dužine λ.

Vezu između apsorpcione i emisione spektralne sposobnosti tela izražava Kirhofov (Kirchoff Gustav Robert, 1824–1887) zakon, po kojem je odnos apsorpcione i emisione spektralne sposobnosti tela nezavisan od prirode tela i potpuno je određen spektralnom raspodelom zračenja u stanju ravnoteže na određenoj temperaturi:

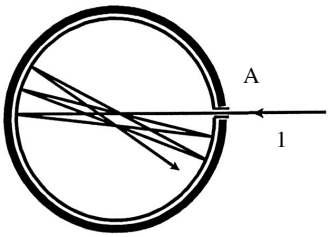
$$\frac{M_\lambda}{A_\lambda} = f(\lambda, T). \tag{3.1.3}$$

Ova jednačina, takođe, pokazuje to da telo koje više apsorbuje, više i emituje. Za apsolutno crno telo je $A_\lambda = 1$ za sve talasne dužine, pa iz (3.1.3) sledi:

$$M_\lambda = f(\lambda, T). \tag{3.1.4}$$

To znači da je spektralna ekscitancija crnog tela, M_λ jedinstvena funkcija temperature i talasne dužine. Ovaj zakon Kirhof je postavio 1859. godine polazeći od termodinamičkih principa.

U prirodi ne postoji telo sa osobinama koje u potpunosti odgovaraju crnom telu. Na primer, telo pokriveno slojem čađi ima $A_\lambda = 1$ samo u ograničenom intervalu talasnih dužina. Crno telo, međutim, može dobro da se predstavi šupljinom koja je okružena ravnomerno zagrejanim zidovima (npr. šupljina ravnomerno zagrejane laboratorijske peći), Slika 3.1.1. Tada se ravnotežno zračenje, koje se uspostavlja u šupljini, odlikuje spektralnom raspodelom energije koja je identična raspodeli za apsolutno crno telo.

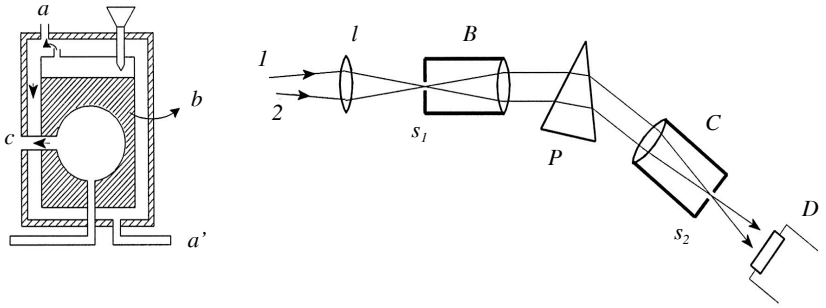


Slika 3.1.1 Šupljina kao crno telo. Zrak ulazi kroz mali otvor u šupljinu iz koje može da izađe tek posle niza refleksija. Kako se pri jednoj refleksiji odbije k-ti deo fluksa, posle n refleksija odbijen je k^n-ti deo prvobitnog fluksa. Pošto je k manje od jedinice, za dovoljno veliki broj refleksija k^n je približno nula, pa je apsorpciona sposobnost bliska jedinici za svaku talasnu dužinu.

3.1.1 Eksperimentalno proučavanje zračenja crnog tela

Ravnomerno zagrejana šupljina u praksi predstavlja model crnog tela. Kroz mali otvor na šupljini oslobađa se zračenje koje se zatim analizira. Na Slici 3.1.2 (levo) kao model crnog tela, po zamisli Lumera (Lummer) i Pringshajma (Pringsheim), uzet je cilindar s dvostrukim zidovima. Prostor između zidova korišćen je kao termostat za održavanje stalne temperature u svim delovima suda. Ovo je ostvareno proticanjem pare ključale vode za visoke temperature, odnosno tečnog vazduha za niske temperature, između zidova cilindra. Pomoću aparature kao na Slici 3.1.2 (desno) izvršeno je spektralno razlaganje emitovanog zračenja. Zračenje crnog tela prvo se fokusira pomoću sočiva l na razrez s_1 kolimatora B. Ovim sočivom postiže se „obasjavanje" prizme snopom paralelnih zraka. Prizma skreće zrake različitih talasnih dužina u različitim pravcima u skladu sa zakonima prelamanja. Pri određenom položaju durbina C kroz pukotinu s_2 prolazi zračenje iz opsega talasnih dužina od λ_1 do $\lambda_1 + \Delta\lambda_1$. Ovo zračenje pada zatim na detektor (u ovim prvim eksperimentima bio je to nagaravljeni termoelement) koji meri gustinu fluksa zračenja. Pri nekom drugom položaju durbina meri se gustina fluksa zračenja u okolini talasne dužine λ_2, tačnije u opsegu talasnih dužina od λ_2 do $\lambda_2 + \Delta\lambda_2$.

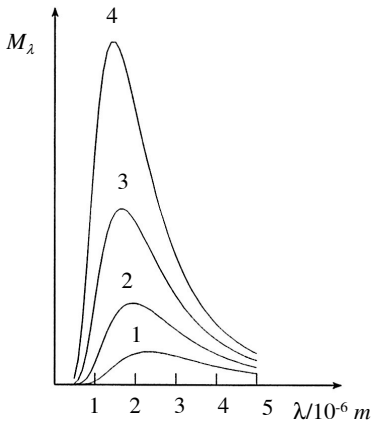
Rezultati ovakvog merenja, zatim, su grafički predstavljeni u pravouglom koordinatnom sistemu, pri čemu se na ordinatu nanosi spektralna ekscitancija M_λ, a na apscisu talasna dužina λ i tako za nekoliko temperatura. Dobijaju se krive koje predstavljaju eksperimentalnim putem određenu zavisnost $M_\lambda(\lambda, T)$, T je apsolutna temperatura i važe za crno telo (Slika 3.1.3). Uočava se to da spektralna ekscitancija (emisiona sposobnost) raste s porastom temperature, pri čemu se apscise maksimuma krivih s porastom temperature pomeraju ka kraćim talasnim dužinama. Na nižim temperaturama vrednosti λ leže u oblasti većih talasnih dužina, pa telo emi-



Slika 3.1.2 Uređaj za analizu zračenja crnog tela: (levo) crno telo prema izradi Lumera i Pringshajma. Pumpa, pomoću koje se menja pritisak u aparaturi, spojena je na priključke *a* odnosno *a′*. Tečni vazduh označen je sa *b*, a zračenje iz šupljine posmatra se kroz mali otvor *c*; (desno) aparatura za spektralno razlaganje zračenja. Sočivo *l* fokusira zračenje crnog tela (zraci 1 i 2) i usmerava ga na razrez s_1 kolimatora *B*, odakle dopire do prizme *P*, koja vrši spektralno razlaganje. Kolimator *C* služi za usmeravanje dobijenog spektra na detektor *D*.

tuje pretežno infracrveno zračenje (zračenje čija je talasna dužina reda veličine stotine mikrona). Krive sličnog toka dobijaju se kada se na ordinati predstavi spektralna gustina energije u_λ koja se definiše kao energja koju emituje jedinična zapremina crnog tela u okolini talasne dužine λ (dimenzije J m^{-4}):

$$u_\lambda = \frac{du}{d\lambda} \Rightarrow u = \int_0^\infty u_\lambda \, d\lambda.$$



Slika 3.1.3 Eksperimentalno dobijena zavisnost spektralne ekscitancije crnog tela od talasne dužine na različitim temperaturama. Krivama 1, 2, 3 i 4 odgovaraju temperature od 977, 1227, 1477 i 1727 ^0C, redom. M_λ se asimptotski približava nuli za male talasne dužine.

Spektralnu gustinu energije crnog tela možemo da definišemo i oko neke frekvencije ν i tada je označavamo sa u_ν (dimenzije J m^{-3} s). Veza između u_λ i u_ν dobija se iz sledećih jednačina:

$$u_\nu d\nu = u_\lambda d\lambda$$

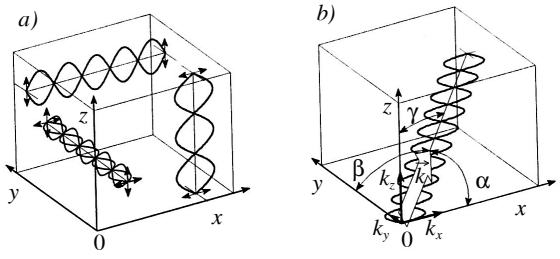
$$\nu = \frac{c}{\lambda}, \quad |d\nu| = \frac{c}{\lambda^2} d\lambda$$

gde je c brzina svetlosti. Iz prethodnih jednačina sledi:

$$u_\nu \frac{c}{\lambda^2} d\lambda = u_\lambda d\lambda \quad \text{ili} \quad u_\nu = u_\lambda \frac{\lambda^2}{c}. \tag{3.1.5}$$

3.1.2 Zakoni zračenja crnog tela

Neke od osobina krivih $M_\lambda = f(\lambda,T)$ sažete su u obliku zakona zračenja. **Stefan-Bolcmanov zakon** glasi:



Slika 3.1.4 Stojeći talasi: a) stojeći talas usmeren duž *x (y, z)*-ose; b) stojeći talas usmeren u proizvoljnom pravcu. (Talasni vektor s koordinatnim osama, *x*, *y* i *z* zaklapa uglove α, β i γ, redom.)

ekscitancija M apsolutno crnog tela proporcionalna je četvrtom stepenu temperature tela T:

$$\int_0^\infty M_\lambda d\lambda = M_e = \sigma T^4 \tag{3.1.6}$$

pri čemu je σ konstanta proporcionalnosti koja po najnovijim merenjima ima vrednost $5{,}67 \times 10^{-8}$ $Wm^{-2}K^{-4}$. Na Slici 3.1.3 ekscitancija M predstavlja površinu ispod krive $M_\lambda = f(\lambda)$ za neku određenu temperaturu T. Do ovog zakona Štefan je došao eksperimentalnim putem 1879, dok ga je Bolcman 1884. objasnio teorijski. Vinov zakon pomeranja (Wilhelm Wien, 1864–1928, dobio Nobelovu nagradu za fiziku 1911), daje vezu između temperature T i apscise maksimuma krivih $M_\lambda = f(\lambda, T)$:

$$\lambda_{max} = \frac{c'}{T}. \tag{3.1.7}$$

Zakon tvrdi da je talasna dužina koja odgovara maksimumu spektralne ekscitancije tela, obrnuto proporcionalna apsolutnoj temperaturi T pri čemu je $c' = 0{,}00289$ Km. Tako na 5000 K maksimum krive leži u žuto-zelenoj oblasti spektra pri $\lambda_{max} = 577$ nm.

3.1.3 Rejli-Džinsov i Vinov zakon zračenja

Pri proučavanju zračenja crnog tela postavio se pred naučnike problem teorijskog objašnjenja eksperimentalnim putem utvrđene spektralne raspodele zračenja predstavljene funkcijama $M_\lambda = f(\lambda, T)$ odnosno $u_\nu = F(\nu, T)$. Oslanjajući se na zakone klasične fizike, Rejli i Džins (J. W. Reyleigh, 1842–1919; J. H. Jeans 1887––1946) su oko 1900. godine, odredili spektralnu raspodelu zračenja crnog tela. Rejli-Džinsova jednačina zračenja crnog tela **nije** bila tačna i samo se u graničnim slučajevima, za velike talasne dužine i visoke temperature, pomoću nje tačno mogla da izračuna energija zračenja. Ipak, ova teorija, pokazujući slabosti i ograničenja klasične fizike, ukazivala je i na način za prevazilaženje ovih ograničenja. Proračun spektralne raspodele zračenja crnog tela sastojao se iz dva dela. U prvom delu Rejli je „prebrojao" elektromagnetne talase određenih frekvencija ν koji nastaju u šupljini kojom predstavljamo crno telo, a u drugom delu pripisao svakom od talasa određenu srednju energiju E_{sr}. Spektralna gustina energije koja nastaje u šupljini tada je jednaka proizvodu broja talasa s frekvencijom u okolini ν i srednje energije po jednom talasu.

Rejli-Džinsova teorija zračenja crnog tela zasnovana je na sledećim razmatranjima. Neka je crno telo zatvorena, evakuisana šupljina oblika kocke zapremine *V,* okružena zidovima na temperaturi *T* koji idealno odbijaju zračenje. Prema Maksvelovoj (Maxwell James Clerk, 1831–1879) elektromagnetnoj teoriji, elektromagnetno zračenje pobuđuje se oscilovanjem električnih dipola (dipol se sastoji iz dva naelektrisanja jednaka po količini, a suprotnog znaka). Tako, oscilovanjem električnih dipola zidova šupljine, u njoj nastaje elektromagnetno polje koje se odlikuje jačinama električnog, $\vec{E}$ i magnetnog polja $\vec{H}$ i gustinom energije u (pogledati i poglavlje 9.3 o zračenju atoma):

$$u = \frac{\varepsilon_0}{2}\vec{E}\cdot\vec{E} + \frac{\varepsilon_0 c^2}{2}\vec{H}\cdot\vec{H}$$

pri čemu je c brzina svetlosti u vakuumu, a ε_0 njegova električna propustljivost. Elektromagnetno polje u šupljini čine elektromagnetni talasi različitih učestanosti (frekvencija) i spektralne gustine u_ν. Elektromagnetne talase nastale u šupljini razložićemo na elementarne (stojeće) talase različitih frekvencija i različitih pravaca. Uzećemo, takođe, da svakom stojećem talasu odgovara neka srednja energija E_{sr} koja je jednaka, što se dokazuje u elektrodinamici, srednjoj energiji linearnog oscilatora čijim je oscilovanjem ovo zračenje pobuđeno. Tada je spektralna energija zračenja crnog tela u_ν jednaka proizvodu broja stojećih talasa s frekvencijama između ν i $\nu + \Delta\nu$ i srednje energije E_{sr}. Istaknimo da broj stojećih talasa frekvencije ν odgovara broju oscilatora frekvencije ν čijim su oscilovanjem pobuđeni ovi talasi. Posmatrajmo, dakle, stojeće talase koji nastaju u kocki ivice *a.* Koordinatni sistem postavljamo kroz ivice kocke, Slika 3.1.4, a posmatramo talas koji se širi u pozitivnom smeru *x*-ose, reflektuje na stranicama kocke koje su paralelne *zy* zidovima stvarajući stojeći talas. Uslov za nastanak ovakvog stojećeg talasa talasne dužine λ u kocki ivice a je:

$$a = n\frac{\lambda}{2} \tag{3.1.8}$$

pri čemu je $n = 0,1,2$. Uslovom (3.1.8) kažemo da se na zidovima talasi „gase", dok je rastojanje između zidova takvo da između njih može da se smesti celi broj polovina talasnih dužina. Slični uslovi važe za stojeće talase koji se prostiru u smeru y- i z-ose.

Posmatrajmo sada opštiji slučaj. Neka se ravni talas širi u pravcu koji sa x-, y- i z-osom zaklapa redom uglove α, β i γ, Slika 3.1.4. Ovo je istovremeno i pravac talasnog vektora $\vec{k}$ ravnog talasa kojeg prikazujemo jednačinom (videti jednačinu D-3.1.13):

$$s_1 = Ae^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} = Ae^{-i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}. \tag{3.1.9}$$

pri čemu je ω ugaona frekvencija, t vreme, $\vec{r}$ radijus vektor bilo koje tačke na ekvifaznoj ravni, a $\vec{k}$ je talasni vektor. Talas reflektovan zidovima kocke prostire se u suprotnom smeru i prikazujemo ga funkcijom:

$$s_2 = Be^{-i(-\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}. \tag{3.1.10}$$

Slaganjem talasa s_1 i talasa s_2 nastaje talas s. Uvešćemo granični uslov takav da je funkcija $s = 0$ u svakom trenutku vremena t za $x,y,z = 0$. Kad u jednačinama (3.1.9) i (3.1.10) umesto r, odnosno x,y,z stavimo vrednosti nula, dobijamo vezu između funkcija s_1, s_2 i s, odnosno koeficijenata A i B da bi postavljeni granični uslov bio zadovoljen:

$$s = 0 = e^{i\omega t}(A + B) \Rightarrow A = -B \Rightarrow s = s_1 + s_2. \tag{3.1.11}$$

Eksponencijalnu funkciju s pretvorićemo sada u trigonometrijski oblik pomoću Ojlerove formule:

$$e^{\pm i\varphi} = \cos\varphi \pm i\sin\varphi$$

$$\begin{aligned} s = s_1 + s_2 &= A^{i\omega t}[\cos(\vec{k}\cdot\vec{r}) - i\sin(\vec{k}\cdot\vec{r}) - \cos(\vec{k}\cdot\vec{r}) - i\sin(\vec{k}\cdot\vec{r})] \\ &= -2iAe^{i\omega t}\sin(\vec{k}\cdot\vec{r}). \end{aligned} \tag{3.1.11a}$$

Drugi uslov koji obezbeđuje da talas ostane „zatvoren" u zapremini kocke je:

$$s = 0 \quad \text{za} \quad x,y,z = a$$

što je ispunjeno kad je:

$$\vec{k}\cdot\vec{r} = n\pi \Rightarrow k_x a + k_y a + k_z a = n\pi \Rightarrow$$

$$k_x a = n_1\pi;\ k_y a = n_2\pi;\ k_z a = n_3\pi \quad (n_1 + n_2 + n_3 = n) \tag{3.1.12}$$

gde su n, n_1, n_2 i n_3 celi brojevi. Ovakav talas, pošto je ograničen na određenu zapreminu, ne može se smatrati progresivnim već predstavlja vrstu oscilatornog procesa zarobljenog u kocki. Kad se uzme u obzir da je intenzitet talasnog vektora:

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{3.1.13}$$

i da je:

$$\cos\alpha = \frac{k_x}{|\vec{k}|} \Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\alpha; \quad \cos\beta = \frac{k_y}{|\vec{k}|} \Rightarrow k_y = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\beta;$$
$$\cos\gamma = \frac{k_z}{|\vec{k}|} \Rightarrow k_z = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\gamma \tag{3.1.14}$$

uslovi definisani jednačinom (3.1.12) postaju:

$$\begin{aligned} a\cos\alpha &= n_1\frac{\lambda}{2} \\ a\cos\beta &= n_2\frac{\lambda}{2} \\ a\cos\gamma &= n_3\frac{\lambda}{2}. \end{aligned} \tag{3.1.15}$$

Rešimo sada (3.1.15) po n_1, n_2 i n_3, zamenivši prethodno λ jednakošću c/ν (c je brzina svetlosti). Dobijamo sledeći sistem jednačina:

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{2a}{c}\nu\cos\alpha \\ n_2 &= \frac{2a}{c}\nu\cos\beta \\ n_3 &= \frac{2a}{c}\nu\cos\gamma. \end{aligned} \tag{3.1.15a}$$

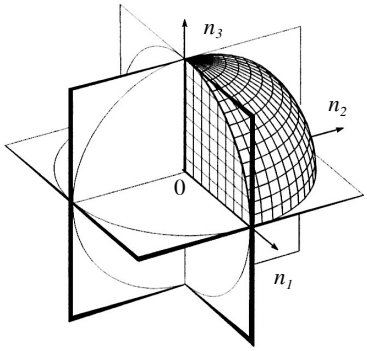
Jednačine (3.1.15) i (3.1.15a) pokazuju da tri broja (n_1, n_2 i n_3) određuju svaki pojedini talas koji ima frekvenciju ν. Dignimo na kvadrat svaku od prethodnih jednačina, a zatim ih međusobno saberemo:

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \frac{4a^2}{c^2}\nu^2. \tag{3.1.16}$$

Jednačina (3.1.16) ne sadrži više kosinuse uglova jer je $\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1$. Zamenićemo sada u jednačini (3.1.16) brojeve n_1, n_2 i n_3 promenljivim x, y i z. Dobijamo izraz koji je jednak jednačini sfere poluprečnika R ($= 2a\nu/c$):

$$x^2 + y^2 + z^2 = R^2; \quad R = \frac{2a}{c}\nu. \tag{3.1.17}$$

Pridružujući promenljivim *x, y* i *z* niz celih brojeva 0, 1, 2, 3,… izdelićemo prostor ovakve sfere na niz kocki jedinične zapremine. Temena takvih kocki imaju koordinate (n_1, n_2 i n_3) a kako je svako teme (ima ih osam) zajedničko za osam susednih kocki, to je svaka kocka jedinične zapremine određena sa tri broja (n_1, n_2, n_3). Kako



Slika 3.1.5 Uz izvođenje Džinsove formule.

jednom stojećem talasu odgovara trojka brojeva (n_1, n_2, n_3), to znači da jedna jedinična kocka predstavlja jedan stojeći talas. Zbir zapremina svih elementarnih kocki, kad je λ dovoljno malo u poređenju s dimenzijama kocke, jednak je **jednoj osmini** zapremine sfere određene uslovom (3.1.17). Faktor 1/8, kojeg je uveo Džins, potreban je zato što uračunavamo samo kocke koje leže u prvom oktantu, Slika 3.1.5. Kako je reč o kockama jedinične zapremine, to je ova zapremina istovremeno jednaka broju elementarnih kocki. Kako je svaka kocka određena trojkom brojeva n_1, n_2, n_3, a svakoj trojki brojeva odgovara jedan stojeći talas, ovo je istovremeno i broj stojećih talasa N s frekvencijama od 0 do ν:

$$N = \frac{1}{8}\frac{4}{3}\pi R^3.$$

Uzimajući u obzir (3.1.17) dobija se:

$$N = \frac{4}{3}\pi\frac{a^3}{c^3}\nu^3. \tag{3.1.18}$$

Za $a = 1$, odnosno pri jediničnoj zapremini:

$$n = \frac{4}{3}\pi\frac{\nu^3}{c^3}. \tag{3.1.18a}$$

Broj stojećih talasa s frekvencijama između ν i $\nu + \Delta\nu$ jednak je 1/8 zapremine sferne ljuske debljine dR i radijusa R i izračunava se diferenciranjem po ν jednačine (3.1.18):

$$dN = \frac{1}{8}4\pi R^2 dR = 4\pi\frac{a^3}{c^3}\nu^2 d\nu.$$

Za jediničnu zapreminu izraz se pretvara u:

$$dn = \frac{4\pi\nu^2}{c^3}d\nu. \tag{3.1.19}$$

Kako je reč o transverzalnim (poprečnim) talasima, a oni mogu da se slože od 2 linearna talasa koji stoje upravno jedan na drugi, jednačinu (3.1.19) ćemo pomnožiti sa 2:

$$dn = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}d\nu \Rightarrow \frac{dn}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}. \tag{3.1.20}$$

Jednačinom (3.1.20) prikazan je **Rejlijev broj** ili broj oscilatora (broj stojećih talasa) čija je frekvencija u okolini ν. Emitovanu energiju po jedinici zapremine, u opsegu frekvencija ν i $\nu + \Delta\nu$, dobićemo kad broj stojećih talasa dn pomnožimo srednjom energijom oscilatora E_{sr}:

$$du = E_{sr}dn \Rightarrow$$

$$u_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}E_{sr}d\nu. \tag{3.1.21}$$

Vrednost srednje energije oscilatora, Rejli je izračunao primenjujući teoremu statističke fizike o ravnomernoj raspodeli energije po stepenima slobode. Prema ovoj teoremi, svakom stepenu slobode kretanja odgovara jednaka srednja kinetička energija i ona iznosi 1/2 kT, gde je k Bolcmanova konstanta, a T temperatura. Kako je srednja potencijalna energija oscilatora jednaka njegovoj srednjoj kinetičkoj energiji, to je ukupna energija oscilatora jednaka:

$$E_{sr} = \frac{1}{2}kT + \frac{1}{2}kT = kT. \tag{3.1.22}$$

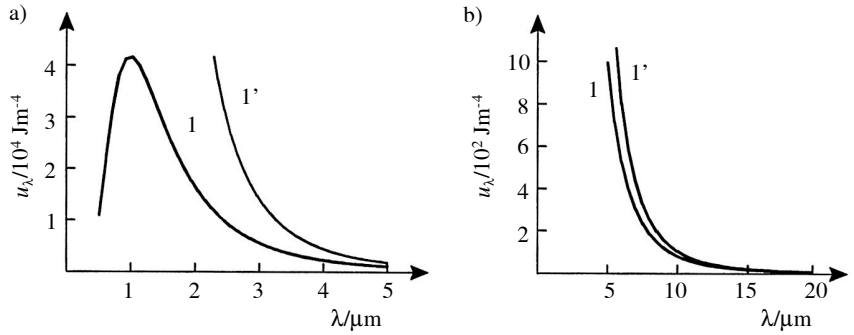
Iz (3.1.22) sledi da srednja energija oscilatora zavisi samo od temperature T, pa, prema tome, može kontinualno da se menja. Zamenjivanjem E_{sr} sa kT u (3.1.18) dobija se:

$$u_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kTd\nu \Rightarrow u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT. \tag{3.1.23}$$

Kad se u jednačini (3.1.23) frekvencija ν zameni odnosom c/λ i uzme u obzir jednačina (3.1.5) dobija se drugi oblik Rejli-Džinsovog zakona:

$$u_\lambda = \frac{8\pi}{\lambda^4}kT. \tag{3.1.24}$$

Jednačinama (3.1.23) i (3.1.24) Rejli i Džins izrazili su raspodelu energije koja se emituje po jedinici zapremine crnog tela u okolini neke talasne dužine λ (odnosno frekvencije ν).



Slika 3.1.6 Spektralna gustina energije crnog tela kao funkcija talasne dužine na temperaturi od 3000 K: a) 1 – kriva dobijena eksperimentalnim putem; 1' – kriva nacrtana na osnovu Rejli-Džinsovog zakona; b) eksperimentalna i teorijska kriva praktično se poklapaju za veće talasne dužine.

Rejli-Džinsov zakon pokazuje slaganje sa eksperimentalno određenom spektralnom raspodelom zračenja crnog tela samo u oblasti **velikih** talasnih dužina i **visokih** temperatura. Za visoke frekvencije odnosno male talasne dužine, Rejli-Džinsova formula daje besmislene rezultate, pošto iz nje sledi da pod tim uslovima crno telo emituje beskonačnu energiju. Takođe, ukupna emitovana energija u celom opsegu frekvencija ν, prema Rejli-Džinsovom zakonu, beskonačna je:

$$\int_0^\infty u_\nu d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3}\int_0^\infty \nu^2 d\nu = \infty.$$

Kako Rejli-Džinsov zakon dovodi do zaključka (koji je u suprotnosti sa eksperimentima) da najveći deo energije u spektru toplotnog zračenja leži u kratkotalasnom delu, P. Erenfest (Paul Ehrenfest, 1880–1933) naziva ovakvo stanje „ultravioletna katastrofa".

Grafički prikaz Rejli-Džinsove jednačine, zajedno sa eksperimentalnom krivom, prikazan je na Slici 3.1.6.

Vin 1896. godine predlaže svoju jednačinu za energiju koju u jedinici zapremine oko neke talasne dužine λ emituje crno telo na temperaturi T:

$$u_\lambda = c_1\lambda^{-5}e^{-\frac{c_2}{\lambda T}} \tag{3.1.25}$$

pri čemu su c_1 i c_2 eksperimentalne konstante. Vinov zakon zračenja dobro tumači spektralnu raspodelu energije crnog tela samo u oblasti **malih** talasnih dužina i **niskih** temperatura.

Oba ova zakona, izvedena krajem 19. veka na osnovu principa klasične mehanike, tačno su prikazivala raspodelu zračenja crnog tela samo u **graničnim** oblastima spektra – ili za velike talasne dužine i temperature (Rejli-Džinsova formula) ili kod malih talasnih dužina i niskih temperatura (Vinova). Nijedna od njih, ni u najgrubljim crtama, nije mogla da protumači eksperimentalne rezultate u celom spektru zračenja crnog tela.

3.2 PLANKOV ZAKON ZRAČENJA

Problem raspodele energije u spektru zračenja apsolutno crnog tela razrešio je Maks Plank (Max Karl Ernst Ludwig Plank, 1858–1947, Nobelova nagrada za fiziku 1918), uvodeći 1900. godine smelu hipotezu koja je protivrečila celokupnom sistemu predstava klasične fizike. Plank je pretpostavio da je energija harmonijskog oscilatora koji osciluje frekvencijom ν, čime se pobuđuje zračenje, **diskretna** veličina. Takva diskretna veličina E izražava se onda kao celobrojni[7] umnožak neke najmanje količine energije E_0, $E = nE_0 = nh\nu$. Sa h je označena univerzalna konstanta, koja predstavlja **najmanje dejstvo** koje postoji u prirodi ($h = 6{,}62 \times 10^{-34}$ Js) i koja će kasnije u čast samoga Planka biti nazvana *Plankova konstanta*, n je ceo broj; vrednost proizvoda $h\nu$ označava elementarnu količinu, odnosno kvant energije. Plankova konstanta je univerzalna konstanta kvantne mehanike. U čisto klasičnoj teoriji materije ova konstanta se ne pojavljuje i zbog svoje male vrednosti nema značaja. O ovoj „novoj" konstanti sam Plank kaže:

„Posle svih ovih rezultata[8], iza kojih stoje mnoga zvučna imena, sudiji koji ne želi da se o činjenice ogluši, ne ostaje nikakva druga mogućnost nego da u sistemu univerzalnih fizičkih konstanti prizna puno građansko pravo i ***kvantu dejstva*** *koji se u svakoj od pojedinačnih, iz šarolikog mnoštva raznovrsnih pojava, pokazuje uvek kao ista veličina, oko 6,54 × 10^{-27} erg.s. Mora izgledati neobično da je priroda, u isto vreme kada je misao o opštoj relativnosti prokrčila sebi put i postala opšteprihvaćena, baš na jednom mestu, gde se to najmanje moglo predvideti, stvorila nešto apsolutno, jednu stvarno nepromenljivu jedinicu mere, pomoću koje se u trenutku vremena sadržana veličina* ***dejstva*** *može predstaviti sasvim određenim, samovoljom prirode, odabranim brojem."*

Prema tome, energije oscilatora mogu da budu:

$$E_0,\ 2E_0,\ 3E_0,\ ....,\ nE_0,\ \ldots;$$

odnosno:

$$h\nu,\ 2h\nu,\ 3h\nu,\ ....,\ nh\nu,\ \ldots\ .$$

Kako frekvencija izračenog odnosno apsorbovanog zračenja odgovara frekvenciji oscilovanja oscilatora, crno telo emituje odnosno apsorbuje energiju **diskontinualno,** u **kvantima** energije. Polazeći od ove ideje, Plank je odredio novu vrednost srednje energije oscilatora.

Pretpostavio je da oscilatori mogu da imaju različite energije, pri čemu:

[7] Ako za nulu energije uzmemo energiju nultog oscilatornog nivoa.

[8] Plank misli na Ajnštajnovo tumačenje fotoefekta i specifičnih toplota čvrstih tela korišćenjem kvanta energije, na oglede Franka i Herca kao i na one u vezi sa x i γ zračenjem, smatrajući istovremeno da je kvantna hipoteza svoju najjaču potvrdu dobila izgradnjom atomske teorije Nilsa Bora.

N_0 oscilatora ima enrgiju 0,

N_1 oscilatora ima energiju $h\nu$,

N_2 oscilatora ima energiju $2h\nu$

N_i oscilatora ima energiju $ih\nu$.

Broj oscilatora N_m sa određenom energijom $E_m = mh\nu$ (za njih se kaže da su u određenom energijskom stanju), odredićemo pretpostavljajući klasičnu, Bolcmanovu, raspodelu oscilatora po energijama:

$$N_m = N_0 e^{-\frac{mh\nu}{kT}}; \quad m = 1, 2, 3, \ldots, i.$$

U gornjoj jednačini k je Bolcmanova konstanta, T je temperatura, a e prirodni broj (= 2.7182818). Srednju energiju oscilatora E_{sr} izračunaćemo kao količnik ukupne energije E svih oscilatora i njihovog broja N:

$$E_{sr} = \frac{E}{N}. \tag{3.2.1}$$

Ukupna energija E može da se predstavi u obliku zbira proizvoda broja oscilatora s određenom energijom i energije oscilatora, s tim što se sumiranje vrši od nule do beskonačnosti:

$$E = 0 \cdot N_0 + h\nu \cdot N_1 + 2h\nu \cdot N_2 + \ldots + ih\nu \cdot N_i =$$
$$= 0 + h\nu N_0 e^{-\frac{h\nu}{kT}} + \ldots + ih\nu N_0 e^{-\frac{ih\nu}{kT}}$$

ili kraće:

$$E = h\nu N_0 \sum_{i=0}^{\infty} i e^{-\frac{ih\nu}{kT}}. \tag{3.2.2}$$

Na sličan način odredićemo ukupni broj oscilatora N:

$$N = N_0 + N_1 + N_2 + \ldots + N_i =$$

$$= N_0 + N_0 e^{-\frac{h\nu}{kT}} + \ldots + N_0 e^{-\frac{ih\nu}{kT}}$$

odnosno:

$$N = N_0 \sum_{i=0}^{\infty} e^{-\frac{ih\nu}{kT}}. \tag{3.2.3}$$

Kombinovanjem jednačina (3.2.1), (3.2.2) i (3.2.3) dobija se:

$$E_{sr} = h\nu \frac{\sum_i i e^{-\frac{ih\nu}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{ih\nu}{kT}}}.$$

Uvešćemo smenu $y = e^{-h\nu/kT}$, pa je tada:

$$E_{sr} = h\nu \frac{\sum_i i y^i}{\sum_i y^i}.$$

Pošto je $y < 1$, izraz u imeniocu predstavlja geometrijsku progresiju čiji je zbir:

$$\sum_{i=0}^{\infty} y^i = \frac{1}{1-y}. \tag{3.2.4}$$

Brojilac može da se preuredi na sledeći način:

$$\sum_{i=0}^{\infty} i y^i = y \frac{d}{dy}\left(\sum_{i=0}^{\infty} y^i\right).$$

Kad iskoristimo (3.2.4) dobijamo:

$$\sum_{i-0}^{\infty} i y^i = y \frac{d}{dy}\left(\frac{1}{1-y}\right) = \frac{y}{(1-y)^2}. \tag{3.2.5}$$

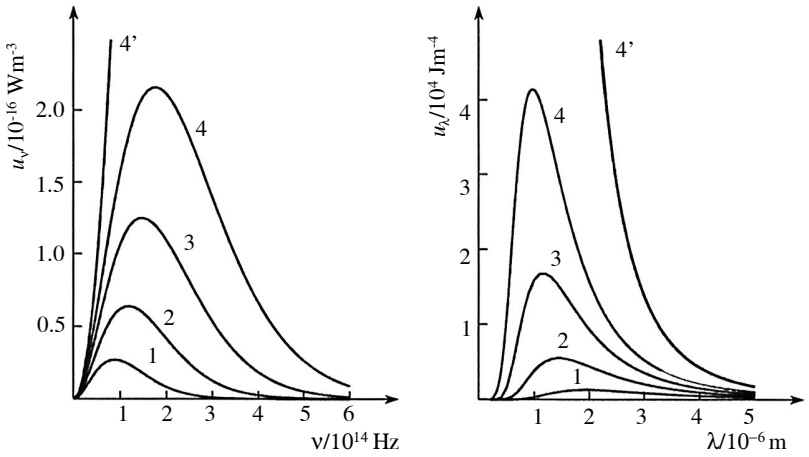
Prema tome, srednja energija oscilatora iznosi:

$$E_{sr} = h\nu \frac{y}{1-y}$$

ili ako umesto y ponovo napišemo $e^{-h\nu/kT}$:

$$E_{sr} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \tag{3.2.6}$$

Energiju u_ν, koju po jedinici zapremine u okolini neke frekvencije ν emituje crno telo, dobićemo kad broj oscilatora frekvencije ν pomnožimo Plankovim izrazom za srednju energiju oscilatora, jednačina (3.2.6), umesto sa kT što je klasični izraz za



Slika 3.2.1 Krive od 1 do 4 predstavljaju Plankov zakon zračenja pri temperaturama od 1500, 2000, 2500 i 3000 K, redom. Krivom 4′ prikazan je Rejli-Džinsov zakon na temperaturi od 3000 K; (levo) prikaz jednačine (3.2.7). Rejli-Džinsova funkcija poklapa se s Plankovom funkcijom samo u oblasti niskih frekvencija; (desno) prikaz jednačine (3.2.8). Rejli-Džinsova funkcija poklapa se s Plankovom funkcijom samo u oblasti velikih talasnih dužina.

srednju energiju oscilatora koju su koristili Rejli i Džins. Kao broj oscilatora Plank uzima istu onu vrednost koju su izračunali Rejli i Džins jer se pretpostavkom o kontinualnosti energije utiče na stepen pobuđenosti oscilatora, odnosno na njihovu srednju energiju ali ne i na njihov broj. Kombinujući (3.1.20) i (3.2.6) dobijamo:

$$u_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}d\nu$$

odnosno:

$$u_\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}. \qquad (3.2.7)$$

Jednačina (3.2.7) predstavlja jedan od uobičajenih izraza **Plankovog zakona zračenja**. Uzimajući u obzir (3.1.5), dobija se Plankov zakon zračenja u drukčijem obliku:

$$u_\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1}. \qquad (3.2.8)$$

Grafički prikaz Plankovog zakona zračenja dat je na Slici 3.2.1a i 3.2.1b.

Plankov zakon zračenja, izveden uz pretpostavku da energije oscilatora mogu da budu samo diskretne, čime se podrazumeva da se energija emituje i apsorbuje diskontinualno (u kvantima), u potpunoj je saglasnosti s eksperimentalnim rezultatima koji se odnose na raspodelu energije u spektru zračenja crnog tela.

Iz Plankove jednačine, kao granični slučajevi, mogu da se izvedu Rejli-Džinsova i Vinova jednačina. Posmatrajmo, najpre, oscilatore koji osciluju vrlo niskim frekvencijama, npr. reda veličine herca. Tada su njihovi susedni energijski nivoi razmaknuti samo za oko 7×10^{-34} J, dakle leže vrlo blizu jedan drugom, pa im je i diskontinualnost praktično neuočljiva, Slika 3.2.2. Plankovu jednačinu, u ovom slučaju, možemo da izrazimo tako što eksponencijalni faktor $e^{h\nu/kT}$ razvijemo u Maklorenov red:

$$e^{\frac{h\nu}{kT}} = 1 + \frac{h\nu}{kT} + \frac{1}{2}\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 + \ldots$$

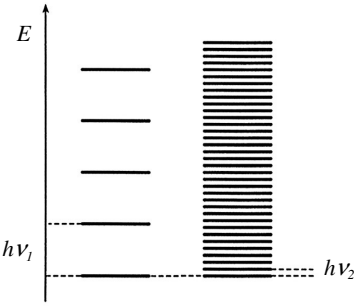
Pošto je $h\nu << kT$, dovoljno dobru aproksimaciju dobijamo ako se zadržimo samo na prva dva člana reda:

$$e^{\frac{h\nu}{kT}} = 1 + \frac{h\nu}{kT}$$

pa je u_ν:

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\,\frac{kT}{h\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT$$

što predstavlja Rejli-Džinsovu jednačinu. Ovakav rezultat mogao je da se očekuje jer kad $h\nu \to 0$, kvantni nivoi leže toliko blizu jedan drugome da takoreći kontinualno prelaze jedan u drugi, pa mogu da se posmatraju i „klasično", Slika 3.2.2 (desno).



Slika 3.2.2 Šematski prikaz energijskih nivoa oscilatora: (levo) kvantni nivoi oscilatora koji osciluje višom frekvencijom su razdvojeni i diskretnost energije je očigledna; (desno) kvantni nivoi oscilatora koji osciluje vrlo niskom frekvencijom toliko su bliski, pa oscilator može da se posmatra na „klasični" način.

Kod visokih frekvencija i niskih temperatura (što je oblast važenja Vinovog zakona), sledi da je $e^{h\nu/kT} \gg 1$, pa u imeniocu Plankove jednačine jedinica može da se zanemari. Tako Plankov zakon za visoke frekvencije i za niske temperature ima matematički oblik:

$$u_\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\,\frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}}}.$$

U poslednjem slučaju kvanti energije su veliki, pa su susedni energijski nivoi oscilatora razmaknuti, Slika 3.2.2 (levo).

Napomenimo još jednom da je Plankova hipoteza o diskontinualnosti energije značila prekretnicu u razvoju moderne fizike i da je kasnije ugrađena u formalizam kvantne mehanike i kvantne elektrodinamike.

Primeri

Primer 3.2.1 Pokazati da važi jednačina $M = \pi I$ gde je M ekscitancija, a I intenzitet zračenja crnog tela.

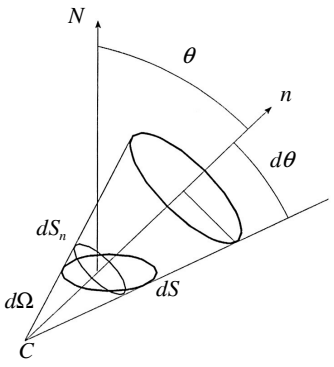
REŠENJE:

Intenzitet zračenja I definišemo kao količinu energije koja se u jedinici vremena izrači sa jedinične površine u u pravcu normale na površinu u jedinični prostorni ugao. Posmatrajmo zračenje sa elementa površine dS, Slika 3.2.3, u smeru n [pri čemu je $\sphericalangle(n,N) = \theta$], obuhvaćeno difirencijalnim elementom prostornog ugla $d\Omega$. Tada, prema Lamberovom zakonu, u označenom smeru efikasno zrači površina dS_n koja je jednaka projekciji površine dS na pravac normalan na n:

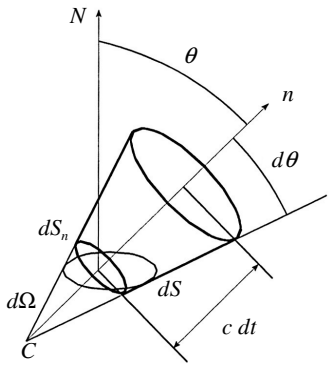
$$dS_n = dS\cos\theta$$

pa je:

$$I = \frac{dE}{\cos\theta\; dS\; d\Omega\; dt}. \tag{3.2.9}$$



Slika 3.2.3 Posmatra se zračenje koje se emituje u smeru normale n u prostorni ugao dΩ.. Efektivno zrači površina dS_n.



Slika 3.2.4 Posle izvesnog vremena dt izračena energija nalazi se u zapremini valjka visine cdt a osnovice dS_n.

Prema definiciji, ekscitanciju crnog tela M dobijamo integraljenjem jednačine (3.2.9) po celom prostoru. Prostorni ugao koji se definiše kao količnik površine elementa sfere i kvadrata radijusa sfere jednak je $d\Omega = \sin\theta\, d\varphi$ (θ je ugao između radijus vektora normalnog na element površine i z-ose, a φ je azimutni ugao, dakle ugao između projekcije radijus vektora na xy-ravan i x-ose), pa je:

$$M = \int I \cos\theta\, d\Omega = I \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos\theta \sin\theta\, d\theta = \pi I \tag{3.2.10}$$

jer je:

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos\theta \sin\theta\, d\theta = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin 2\theta\, d\theta = \frac{1}{2}.$$

Primer 3.2.2 Dokazati da između intenziteta zračenja crnog tela I i energije koju crno telo izrači po jedinici zapremine u postoji veza:

$$u = \frac{4\pi}{c} I \tag{3.2.11}$$

gde je c brzina svetlosti.

REŠENJE:

Sa površine dS za vreme dt izrači se u smeru n, koji s normalom na dS, N, zaklapa ugao $\theta + d\theta$, u elementarni prostorni ugao $d\Omega$, energija dE, Slika 3.2.4

$$dE = I \cos\theta\, d\Omega\, dS\, dt.$$

Posle vremena dt ova energija naći će se u zapremini:

$$dV = c\, dt\, dS_n$$

gde je c brzina svetlosti. Gustina zračenja energije je tada:

$$du = \frac{dE}{dV} = \frac{I \cos\theta\, dS\, d\Omega\, dt}{c\, dt\, dS_n} = \frac{I}{c} d\Omega$$

jer je $dS \cos\theta = dS_n$. Posle skraćivanja i integraljenja dobijamo:

$$u = \frac{I}{c} \int d\Omega = \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{4\pi}{c} I.$$

Ako je reč o potpunom nepolarizovanom zračenju važi jednačina:

$$u = \frac{8\pi}{c} I$$

jer je nepolarizovani zrak, u pogledu prenošenja energije, ekvivalentan s dva zraka istog intenziteta, koji su polarizovani u dvema uzajamno normalnim ravnima.

Primer 3.2.3 Izvesti Stefan-Bolcmanov zakon pomoću Plankovog zakona zračenja i odrediti vrednost Stefan-Bolcmanove konstante.

REŠENJE:

Ukupna gustina energije zračenja apsolutno crnog tela je:

$$u = \int_0^\infty u_\nu d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \, d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \frac{\nu^3 e^{\frac{-h\nu}{kT}}}{1 - e^{\frac{-h\nu}{kT}}} \, d\nu .$$

Kako je:

$$\frac{1}{1 - e^{\frac{-h\nu}{kT}}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{-nh\nu}{kT}}$$

zbir geometrijske progresije, sledi:

$$u = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{kT}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{-nh\nu}{kT}} d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \nu^3 \sum_{n=1}^{\infty} e^{\frac{-nh\nu}{kT}} d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^\infty \nu^3 e^{\frac{-nh\nu}{kT}} d\nu .$$

(Smatramo da je dozvoljeno izvući sumu ispred znaka integracije.) Posle parcijalnog integraljenja dobija se:

$$u = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 6 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} .$$

Kako je:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}$$

dobija se:

$$u = \frac{8\pi^5 k^4}{15 h^3 c^3} T^4 .$$

Na osnovu (3.2.9) i (3.2.10) sledi da je:

$$M = \frac{c}{4}u\,.$$

Na osnovu toga je:

$$M = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3c^2}T^4 \Rightarrow$$

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3c^2} = \frac{2\pi^5\left(1{,}38066\times10^{-23}\frac{J}{K}\right)^4}{15\left(2{,}997925\times10^{8}\frac{m}{s}\right)^2\times(6{,}62618\times10^{-34}Js)^3}$$

$$\sigma = 5{,}67\times10^{-8}Wm^{-2}K^{-4}\,.$$

Primer 3.2.4 Odrediti broj kvanata talasne dužine od 500 do 520 nm, koje zrači crno telo zapremine 1cm^3 na temperaturi od 2000 K.

REŠENJE:

Energiju koju, po jedinici zapremine, zrači crno telo u opsegu talasnih dužina λ i $\lambda + d\lambda$ (pogledati jednačinu 3.2.8) je:

$$u_\lambda d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1}d\lambda\,.$$

U našem slučaju uzećemo za λ srednju vrednost, dakle 510 nm, a za $d\lambda = \Delta\lambda = 10$ nm, pa je:

$$u_\lambda\times\Delta\lambda = 8\pi\frac{(6{,}626\times10^{-34}Js)\times\left(2{,}998\times10^{8}\frac{m}{s}\right)}{(510\times10^{-9}nm)^5}\times$$

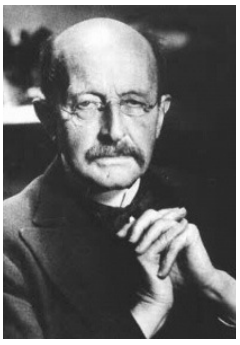
$$\times\ \frac{1}{\exp\left(\dfrac{6{,}626\times10^{-34}Js\times\left(2{,}998\times10^{8}\frac{m}{s}\right)}{(510\times10^{-9}m)\times\left(1{,}381\times10^{-23}\frac{J}{K}\right)\times(2000K)}\right)-1}\times10\times10^{-9}m$$

ili:

$$u_\lambda \Delta\lambda = \frac{0,145 \times 10^8}{e^{14,102} - 1} = 1,086 \times 10^{-7} \frac{J}{m^3}.$$

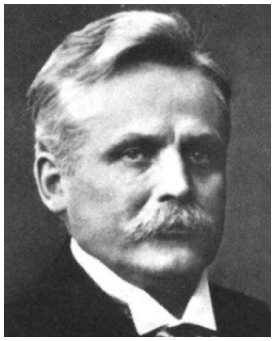
Jedan foton nosi energiju hc/λ, pa je broj fotona n:

$$n = \frac{u_\lambda \cdot \Delta\lambda}{h \cdot \frac{c}{\lambda}} = \frac{\left(1,086 \times 10^{-7} \frac{J}{m^3}\right) \times (510 \times 10^{-9} m)}{(6,626 \times 10^{-34} Js) \times (2,998 \times 10^8 m)} = 2,78 \frac{fotona}{cm^3}.$$



Maks Ernst Ludvig Plank (Max Karl Ernst Ludwig Planck, 1858–1947), rođen je u Kilu (Nemačka), a diplomirao je na Berlinskom univerzitetu. Doktorirao je u 21. godini s tezom iz termodinamike. Godine 1885. postao je profesor na Kilskom univerzitetu, a 1889. profesor teorijske fizike na Berlinskom univerzitetu. U okviru termodinamičkih istraživanja počeo je da se bavi problemom toplotnog zračenja i godine 1899, još uvek smatrajući da je Vinova radijaciona jednačina ispravna, otkrio je novu prirodnu konstantu – Plankov kvant dejstva. Godine 1900. postavio je jednačinu koja je ispravno opisivala zakon zračenja crnog tela. Dan kad je Plank otkriće ove jednačine saopštio Nemačkom fizičkom društvu, 14. decembar 1900, smatra se, „rođendanom kvantne teorije". Godine 1918. dobio je Nobelovu nagradu za fiziku, za otkriće energijskih kvantova.

Vilhelm Vin (Wilhelm Wien, 1864–1928), rođen je u Gafkenu (Nemačka) i bio je profesor u Ahenu, Gisenu, Vircburgu i Minhenu. Još dok je bio Helmholcov asistent, 1893. godine, otkrio je zakon pomeraja. Godine 1896. objavio je (mada samo približno tačan) zakon zračenja crnog tela. Nobelovu nagradu za fiziku dobio je 1911. godine za otkrića u vezi sa zakonima zračenja toplote.



Lord Džon Vilijams Strut Rejli (John Williams Strutt, 3rd baron Rayleigh, 1842–1919), rođen je u Langford Grovu. Bio je profesor u Kevendišovoj laboratoriji u Kembridžu (1879–1884) i u Kraljevskom društvu u Londonu (1884–1905). Između ostalog, ispitivao je intenzitet zvuka mereći pritisak na pokretnoj pločici (Rejlijev disk), zaključio da plava boja neba potiče od rasejanja svetlosti na molekulima u vazduhu (Rejlijevo rasejanje) i godine 1905. postavio zakon zračenja poznat kao Rejli-Džinsov zakon, koji predstavlja specijalni slučaj Plankovog zakona. Neslaganja u merenju brzine zvuka u azotu dovela su njega i Remzija do otkrića argona 1894. godine. Nobelovu nagradu za fiziku dobio je 1904. godine za istraživanje gustine najvažnijih gasova i za otkriće argona u vezi s tim ispitivanjima.

4. STARA KVANTNA TEORIJA

Ono što se danas podrazumeva pod „starom kvantnom teorijom" započeto je Plankovom teorijom zračenja crnog tela. Plankovu ideju su prihvatili i dalje razvijali Ajnštajn, Debaj a u dokazivanju postojanja Plankove konstante bitnu ulogu su odigrali eksperimenti Franka i Herca. Kvantna hipoteza je u teoriji strukture atoma mogla biti primenjena nakon čuvenih eksperimenata Raderforda kojima je pokazano da se atom sastoji od pozitivno naelektrisanog jezgra, u kome je praktično skoncentrisana sva masa atoma, okruženog lakim negativno naelektrisanim česticama, elektronima (videti poglavlje 10.1 – Raderfordov ogled).

4.1 OPTIČKI SPEKTAR VODONIKOVOG ATOMA

Nezavisno od hipoteze o strukturi atoma, veoma rano je bilo uočeno da se o atomima može mnogo naučiti ispitivanjem njihovih linijskih spektara.

U drugoj polovini XIX veka bilo je opaženo desetine hiljada spektralnih linija različitih elemenata. U njihovom pronalaženju naročito su se istakli Runge (Carl David Tolmé Runge, 1856–1927), Kajzer (Heinrich Gustav Johannes Kayser, 1853–1940) i Pašen (Friedrich Paschen, 1865–1940). Tako ogromna masa podataka pažljivo je uređena u vidu tablica. Do 1913. godine totalni broj radova iz spektralne analize dostigao je cifru od pedeset hiljada. Tada je, na primer, već bilo poznato i to da žuta natrijumova D linija u stvari predstavlja dve veoma bliske linije $D_1 = 5895{,}9236$ Å i $D_2 = 5889{,}9504$ Å.

Međutim, krajnji cilj svake nauke nije prikupljanje činjenica nego uspostavljanje veza između različitih pojava na osnovu prikupljenih činjenica i pronalaženja uzroka za te veze. Bilo je jasno da tako masivne tablice spektralnih linija sadrže izvanredno mnogo podataka o strukturi atoma; problem je bio kako te podatke izvući iz njih.

4.1.1 Balmerova serija

Prvi koji je uočio neku vrstu sistema u mnoštvu brojeva koje su sadržavale tablice bio je Balmer (Johann Jakob Balmer, 1825–1898). On je 1885. godine zapazio da redosled četiri linije u vidljivom delu spektra vodonikovog atoma može da se opiše sledećim izrazom:

$$\lambda = b\frac{k^2}{k^2 - n^2} \tag{4.1.1}$$

gde je $n = 2$, $k = 3, 4, 5$ ... i $b = 3645{,}6$ Å. Ovaj jednostavni izraz ima izvanredan značaj stoga što je **tačan,** kao što se može videti iz Tabele 4.2.1. Druga kolona pokazuje talasne dužine za prve četiri linije vidljivog dela spektra vodonikovog atoma izračunate po Balmerovoj formuli a treća eksperimentalne vrednosti koje je mnogo godina ranije dobio Angstrem (Anders Jons Ångstrem, 1814–1874).

Balmerovo otkriće otvorilo je novu eru u nauci o atomima. Pre isteka godine od objavljivanja Balmerove formule Runge je primetio, 1886. godine, da Balmerova formula postaje mnogo očiglednija ako se talasna dužina λ zameni frekvencijom, $\nu = c/\lambda$:

$$\nu = \frac{4c}{b}\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{k^2}\right). \tag{4.1.2}$$

Tabela 4.2.1 Talasne dužine linija vodonikovog atoma po Balmeru

Oznaka linije	Izračunata talasna d.(Å) (Balmer)	Izmerena talasna d.(Å) (Ångstrem)	n	k
H_α	6562,08	6562,1	2	3
H_β	4860,80	4860,74	2	4
H_γ	4340,0	4340,1	2	5
H_δ	4101,3	4101,2	2	6

Godine 1890, Ridberg (Johannes Robert Rydberg, 1854–1919), predložio je da se formula piše u obliku u kome se koristi i danas:

$$v = cR\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right) \tag{4.1.3}$$

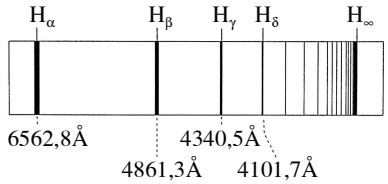
gde je c brzina svetlosti, a n i k proizvoljni celi brojevi, $n < k$. Konstanta R koja iznosi $109677{,}576 \pm 0{,}012\ \text{cm}^{-1}$ naziva se Ridbergova konstanta. S obzirom na to da je $\nu/c = \tilde{\nu}$ konačno dobijamo:

$$\tilde{\nu} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right). \tag{4.1.4}$$

Uzimajući da je $n = 2$ možemo izračunati celu Balmerovu seriju, za koju su eksperimentalno pronađeni članovi sve do $k = 37$.

U isto vreme javila se i ideja da se frekvencija spektralnih linija izrazi kao razlika dva spektralna terma (člana), T_n i T_k:

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} = T_n - T_k \tag{4.1.5}$$



Slika 4.1.1 Spektar vodonikovog atoma – Balmerova serija.

što samo za sebe ne predstavlja naročito poboljšanje. Međutim, 1908. godine, Ric (Walter Ritz, 1878–1909), objasnio je prednosti ove reprezentacije formulišući poznati **kombinacioni princip**: frekvencija (talasni broj) svake linije u spektru bilo kog atoma može se predstaviti kao razlika dva spektralna terma T_n i T_k. Ovo važi čak i u slučaju kada se posebni termovi ne mogu izraziti u tako jednostavnoj formi kao kod vodonikovog atoma.

4.1.2 Lajmanova, Pašenova i druge serije

Uporedo sa Balmerovom serijom u spektru koji daje vodonik u atomskom stanju zapažen je i niz drugih serija koje se predstavljaju istom formulom. Tako je u dalekoj ultraljubičastoj oblasti spektra Lajmen (Lyman), 1914, otkrio seriju:

$$\tilde{\nu} = R\left(1 - \frac{1}{k^2}\right) \tag{4.1.6}$$

$k = 2, 3, 4, ...$
U infracrvenoj oblasti nađene su tri serije:
Pašenova (Paschen), 1908,

$$\tilde{\nu} = R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{k^2}\right) \tag{4.1.7}$$

$k = 4, 5, 6, ...$
Breketova (Bracket), 1922,

$$\tilde{\nu} = R\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{k^2}\right) \tag{4.1.8}$$

$k = 5, 6, 7, ...$
Pfundova (Pfund), 1924,

$$\tilde{\nu} = R\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{k^2}\right) \tag{4.1.9}$$

$k = 6, 7, 8, ...$
U Tabeli 4.2.2 prikazane su talasne dužine (talasni brojevi) karakterističnih linija iz spektra vodonikovog atoma.

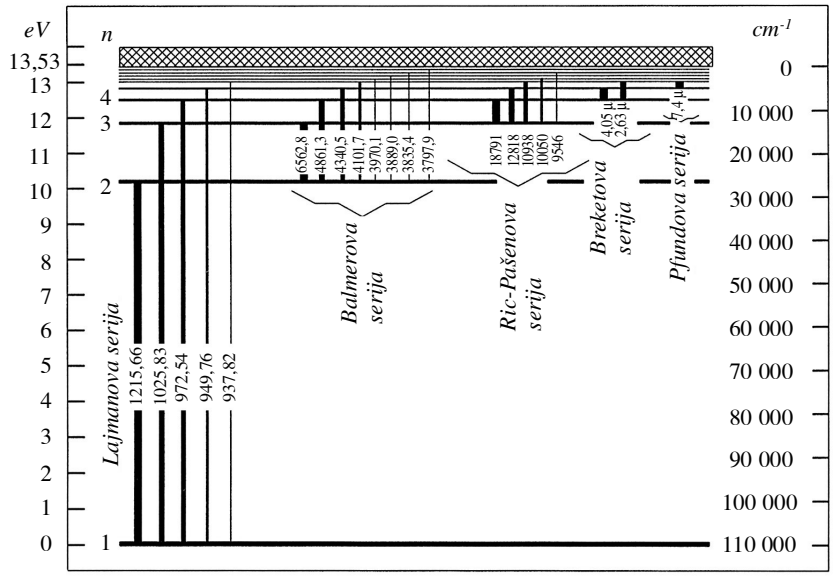
Tabela 4.2.2 Talasne dužine i talasni brojevi prvih nekoliko linija iz različitih serija spektra vodonikovog atoma

n	1	2	3	4	5
k	Lajmen	Balmer*	Pašen	Breket	Pfund
2	1216 Å 82257cm^{-1}	6563 Å			
3	1026 Å 97466 cm^{-1}	15233cm^{-1}			
4	973 Å 102807cm^{-1}	4861 Å 20565cm^{-1}	18751 Å 5333 cm^{-1}		
5	950 Å 105263cm^{-1}	4340 Å 23033cm^{-1}	12818 Å 7801cm^{-1}	40500 Å 2467cm^{-1}	
6	938 Å 106630cm^{-1}	4102 Å 24374cm^{-1}	10938 Å 9142cm^{-1}	26300 Å 3799cm^{-1}	74000 Å 1350cm^{-1}

*Ovde su unete novije vrednosti za talasnu dužinu linija a ne one koje je dobio Angstrem a koje su pokazane u Tabeli 4.2.1.

Iz tabele se jasno vidi da Lajmenova serija pada u ultraljubičastu oblast ($\lambda < 3700$ Å) Balmerova u vidljivu (3700 Å $< \lambda <$ 6700 Å), a Pašenova, Breketova i Pfundova u infracrvenu ($\lambda >$ 6700 Å). Iz Tabele se, takođe, može neposredno proveriti Ricov kombinacioni princip koji se može izraziti i na sledeći način:

$$\tilde{\nu}_{kk'} = \tilde{\nu}_{nk'} - \tilde{\nu}_{nk}$$



Slika 4.1.2 Šema termova *H*-atoma. Talasne dužine spektralnih linija izražene su u angstremima. (1Å = 0,1 *nm*).

Prvi indeks označava glavni kvantni broj osnovnog a drugi pobuđenog stanja. Na primer, talasni broj prelaza sa $k' = 4$ na $k = 3$ (što odgovara prvoj liniji iz Pašenove serije) može se dobiti bilo iz Lajmenove serije gde je $n = 1$:

$$\tilde{\nu}_{34} = \tilde{\nu}_{14} - \tilde{\nu}_{13} = 102807 \text{ cm}^{-1} - 97466 \text{ cm}^{-1} = 5332 \text{ cm}^{-1}$$

ili iz Balmerove, $n = 2$:

$$\tilde{\nu}_{34} = \tilde{\nu}_{24} - \tilde{\nu}_{23} = 20565 \text{ cm}^{-1} - 15233 \text{ cm}^{-1} = 5332 \text{ cm}^{-1}.$$

Vezu između različitih serija najlakše je uočiti iz Grotrijanovog dijagrama, Slika 4.1.2, u kome su po vertikalnoj osi naneti spektralni termovi. Pošto se, prema Plankovoj relaciji $E = h\nu = hc/\lambda = hc\tilde{\nu}$, svakoj frekvenciji može pripisati određena energija, to se i svakom spektralnom termu može pridružiti određeni energijski nivo. Iz dijagrama je očigledno to kako se obrazuju različite spektralne serije. Svaka serija ima jedan osnovni term koji u kombinaciji sa ostalim, višim termovima generiše seriju. S obzirom na to da se razlika među termovima menja sa $1/k^2$, sa porastom k ovaj član brzo teži nuli kada se dostiže granica serije.

4.2 BOROV MODEL ATOMA

Činjenica da je iz Raderfordovog ogleda usledio nuklearni model atoma kao i to da je na osnovu spektroskopskih merenja bilo moguće definisati unutrašnje nivoe u atomima nije bila dovoljna da objasni brojne protivrečnosti o strukturi atoma, posebno njegovu stabilnost. Po modelu Raderforda atomsko jezgro prečnika $\approx 10^{-14}$ m nosi celokupno pozitivno naelektrisanje atoma, $+Ze$. Oko njega se nalazi Z elektrona čineći atom elektroneutralnim. Jasno je da se elektroni moraju kretati jer bi inače u stanju mirovanja bili privučeni pozitivnim jezgrom (pali bi u njega) pa atom kao celina ne bi bio stabilan. Stoga je pretpostavljeno da se elektroni oko jezgra kreću u kružnim orbitama poput planeta oko Sunca.

4.2.1 Osnovne interakcije

Posmatrajmo atom vodonikovog tipa, tj., atomsko jezgro naelektrisanja, $+Ze$, mase, M, oko koga se po kružnoj orbiti radijusa r, kreće samo jedan elektron čije je naelektrisanje $-e$ a masa m. S obzirom na to da je masa jezgra oko 2000 puta veća od mase elektrona, u prvoj aproksimaciji kretanje jezgra može se zanemariti. U konstantnoj kružnoj orbiti elektron se održava ravnotežom između elektrostatičke sile privlačenja i centrifugalne sile. S obzirom na to da je elektrostatička sila između dva tačkasta naelektrisanja data Kulonovim zakonom:

$$F_q = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} \tag{4.2.1}$$

a centrifugalna sila izrazom:

$$F_c = \frac{m\upsilon^2}{r} \tag{4.2.2}$$

imamo:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m\upsilon^2}{r} \tag{4.2.3}$$

gde je υ periferna brzina elektrona po orbiti radijusa r. Odavde možemo dobiti izraz za kinetičku energiju elektrona, T:

$$T = \frac{m\upsilon^2}{2} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2r}\,. \tag{4.2.4}$$

Potencijalnu energiju elektrona, U, dobijamo iz činjenice da je ona jednaka radu, A, koji se izvrši da bi se elektron iz beskonačnosti doveo na rastojanje r od jezgra:

$$A = \int_{\infty}^{r} F_q dr = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_{\infty}^{r}\frac{Ze^2}{r^2}dr = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \tag{4.2.5}$$

$$U = A = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\,. \tag{4.2.6}$$

S obzirom na to da se elektron i jezgro privlače, prilikom njihovog približavanja vrši se negativni rad pa je potencijalna energija negativna (u potpunoj analogiji sa potencijalnom energijom mase u gravitacionom polju). Ukupna energija dobija se sabiranjem potencijalne, U, i kinetičke, T:

$$E = U + T \tag{4.2.7}$$

ili s obzirom na to da je [upoređenjem (4.2.4) i (4.2.6)] $U = -2T$:

$$E = -2T + T = -T \tag{4.2.8}$$

$$E = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2r}\,. \tag{4.2.9}$$

Negativni predznak ukupne energije pokazuje da je elektron u vezanom stanju.

Prema zakonima klasične elektrodinamike naelektrisanje u ubrzanom kretanju neprekidno emituje elektromagnetnu energiju. U slučaju elektrona koji se kreće oko atomskog jezgra to bi značilo da prema zakonima klasične elektrodinamike on treba neprekidno da emituje zračenje. Pošto u tom procesu postepeno gubi energiju, spektar emitovanog zračenja bi bio kontinualan, a elektron bi u vremenskom intervalu reda veličine 10^{-8} sekundi pao u jezgro. S obzirom na to da se atomi odlikuju izuzetno velikom stabilnošću i da su atomski spektri linijski, jasno je da je klasična elektrodinamika neprimenjiva na mikroskopske, atomske sisteme.

4.2.2 Borovi postulati

Problem primene klasične elektrodinamike na atomske sisteme rešio je 1913. godine Bor (Niels Henrik David Bohr, 1885–1962, Nobelovu nagradu za fiziku dobio 1922. godine) predloživši teoriju koja je uspešno objasnila spektre jednoelektronskih atoma. Jednom je Nils Bor rekao:

„Nemogućnost teorija klasične fizike da objasne atomske fenomene je potom još više došla do izražaja napretkom našeg znanja o strukturi atoma. Raderfordovo otkriće atomskog jezgra (1911) je odjednom otkrilo nepogodnost pojmova klasične mehanike i klasičnog magnetizma da objasne stabilnost atoma. I ovde je opet kvantna teorija dala ključ za razjašnjenje situacije, a, posebno, postalo je moguće objašnjenje atomske stabilnosti, kao i empirijskih zakona koji upravljaju spektrima elemenata, polazeći od pretpostavke da se svaka reakcija atoma u kojoj dolazi do izmene energije događa u potpunosti preko prelaza između tzv. stacionarnih stanja, i da spektri nastaju u stepenastim procesima u kojima je svaki prelaz praćen emisijom monohromatskog svetlosnog kvanta."

Osnovi teorije mogu se izložiti u obliku Borovih postulata (pretpostavki):

1) Kulonova sila saopštava planetarnom elektronu centripetalno ubrzanje potrebno za dinamički stabilnu kružnu putanju;

2) dozvoljene su samo one orbite kod kojih je moment impulsa (ugaoni moment) elektrona celobrojni umnožak $\hbar$ gde je $\hbar = h/2\pi$: $m\upsilon r = n\hbar$, $n = 1, 2, \ldots$ i h Plankova konstanta;

3) elektron koji se kreće po stabilnoj orbiti ne zrači;

4) emisija ili apsorpcija zračenja dešava se samo za vreme prelaska elektrona iz jedne orbite u drugu.

Prvim postulatom prihvaćen je planetarni model atoma kao i činjenica da su dominantne interakcije u atomu elektrostatičke prirode.

Iz drugog postulata sledi da je pored naelektrisanja i energije u atomskim sistemima kvantiran i moment količine kretanja.

Treći postulat odbacuje problematičnu tvrdnju da naelektrisanje u ubrzanom kretanju mora da zrači u atomskim sistemima uprkos njenoj valjanosti u makroskopskom svetu.

Četvrti postulat uspostavlja vezu sa Plankovom teorijom zračenja, pošto je frekvencija fotona koji se emituje ili apsorbuje data energijskom razlikom dva stanja podeljenom sa h.

Borovi postulati se jednačinama mogu izraziti na sledeći način:

1) $$E = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2r};$$

2) $$L = m\upsilon r = n\hbar,\ \hbar = h/2\pi,\ n = 1,2,3,\ldots;$$

3) $E_1, E_2, E_3, \ldots$ diskretna, stabilna stanja;

4) $$\nu = (E_i - E_j)/h.$$

Iz drugog postulata proizlazi:

$$\upsilon = \frac{n\hbar}{mr}. \tag{4.2.10}$$

Zamenjujući (4.3.10) u (4.3.4) dobijamo izraz za radijus dopuštenih orbita, r_n:

$$r_n = 4\pi\varepsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{Ze^2m} \tag{4.2.11}$$

$$n = 1, 2, ...$$

Za $n = 1$, $r_1 = 0{,}529$Å, pa je:

$$r_n = r_1 \frac{n^2}{Z}. \tag{4.2.12}$$

Radijus orbite svakog stanja proporcionalan je kvadratu njegovog glavnog kvantnog broja, n^2.

Zamenom r_n u izrazu (4.2.9) dobijamo dopuštene energije u funkciji od glavnog kvantnog broja:

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}; \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.2.13}$$

Za vodonik je $Z = 1$ pa sledi:

$$E_n = -13,6 \frac{1}{n^2} eV \tag{4.2.14}$$

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

4.2.3 Ridbergova konstanta i spektralne serije

Iz četvrtog Borovog postulata neposredno dobijamo da je:

$$\tilde{\nu} = \frac{E_n - E_k}{hc} \tag{4.2.15}$$

odakle zamenom u jednačini (4.2.13) za kvantne brojeve n i k dobijamo:

$$\tilde{\nu}_{nk} = \frac{me^4}{64\pi^3\varepsilon_0^2 c\hbar^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right) \tag{4.2.16}$$

ili s obzirom na to da je:

(4.1.4) $$\tilde{\nu} = R \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \tag{4.2.17}$$

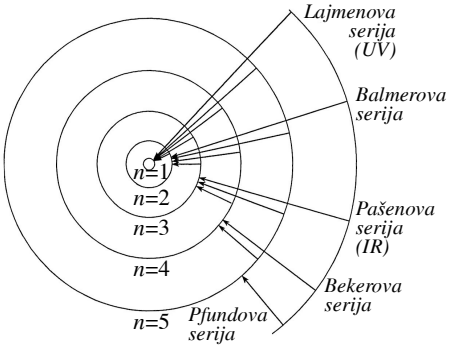
uporeñenjem (4.2.16) i (4.2.17) dobijamo Ridbergovu konstantu kao kombinaciju drugih univerzalnih konstanti:

$$R_\infty = \frac{me^4}{64\pi^3 \varepsilon_0^2 \, c\hbar^3} \tag{4.2.18a}$$

$$R_\infty = \frac{E_0}{hc}. \tag{4.2.18b}$$

Indeks ∞ označava da je Ridbergova konstanta izračunata pod pretpostavkom da atomsko jezgro ima beskonačno veliku masu u odnosu na masu elektrona. Zamenom odgovarajućih vrednosti za masu i naelektrisanje elektrona te za Plankovu konstantu i brzinu svetlosti, na osnovu Borovog modela dobija se da je $R_\infty = 1{,}0973731 \times 10^{+7}$ m^{-1} što je u dobroj saglasnosti sa eksperimentalno dobijenom vrednošću, $R = 1{,}09677576 \times 10^{+7}$ m^{-1}. Ovako dobro slaganje predstavljalo je veliki uspeh Borove teorije jer je Ridbergovoj konstanti, kao važnom empirijskom parametru, dala fizički smisao.

Iz načina na koji je Ridbergova konstanta izračunata po Borovom modelu sledi da empirijski utvrñene vrednosti spektralnih termova predstavljaju energijska stanja elektrona u različitim stacionarnim stanjima atoma vodonika. Na Slici 4.2.1 šematski je prikazan Borov model atoma vodonika kao i poreklo spektralnih serija u njemu. Neutralni atom vodonika sadrži samo jedan elektron. Do pojave spektralne linije dolazi prilikom prelaska elektrona iz nižeg u više stanje kada se zračenje apsorbuje (apsorpcioni spektar) ili iz višeg u niže kada se zračenje emituje (emisioni spektar). Da li će izvesna spektralna linija biti opažena bilo u apsorpcionom bilo u emisionom spektru zavisi od zauzetosti energijskih stanja, tj. od početnog stanja u kome se nalazi elektron. Apsorpcija iz odreñenog stanja podrazumeva da se elektron već nalazio u tom stanju.

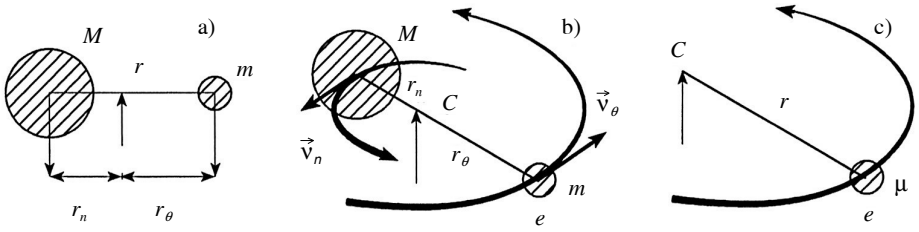


Slika 4.2.1 Šematski prikaz Borovog atomskog modela i porekla spektralnih serija.

Prilikom emisionog prelaza, elektron pada sa višeg na niže, nepopunjeno stanje. Normalno, pre toga elektron mora biti podignut u više energijsko stanje procesom pobuđivanja (ekscitacije), tj. uz utrošak energije. Na normalnim temperaturama u apsorpcionom spektru atoma vodonika opažaju se samo linije Lajmenove serije pošto je tada samo najniže energijsko stanje elektrona popunjeno, $n = 1$, Slika 4.2.1. Ako se u apsorpcionom spektru pojave i linije neke druge serije, na primer Balmerove, može se zaključiti da su, u uslovima u kojima se nalaze apsorbujući atomi, i stanja sa $n > 1$ delom naseljena. Pojava linija Balmerove serije u apsorpcionom spektru vodonika nedvosmisleno ukazuje na to da se kod nekih atoma elektron nalazi u stanju sa $n = 2$. Ta činjenica predstavlja osnovu za spektroskopsko merenje temperature zvezda. Na dovoljno visokim temperaturama, usled termalne ekscitacije atomi, elektroni u atomu vodonika zauzimaju različita energijska stanja. U ravnoteži, naseljenost pojedinih stanja ponaša se po Bolcmanovom zakonu raspodele. Iz relativnog intenziteta linije Lajmenove i Balmerove serije u apsorpcionom spektru moguće je eksperimentalno utvrditi relativnu naseljenost stanja za $n = 1$ i $n = 2$ a odatle primenom Bolcmanovog zakona i ravnotežnu temperaturu atoma vodonika koji apsorbuju zračenje. Tako je, na primer, na površini Sunca na osnovu intenziteta apsorpcionih linija nađeno da je odnos broja atoma vodonika kod kojih se elektron nalazi u stanju sa $n = 1$ prema broju atoma za koji je $n = 2$ približno $1{:}10^{-8}$. Odatle se dobija da je na površini Sunca T = 6000 K.

4.2.4 Zavisnost Ridbergove konstante od mase jezgra

Neslaganje između teorijske i eksperimentalne vrednosti od 0,1% u drugim okolnostima moglo bi se zanemariti. Međutim, imajući na umu da su sve konstante koje su korišćene za izračunavanje R_∞ poznate sa mnogo većom tačnošću, jasno je da razlika između teorije i eksperimenta potiče od nesavršenosti teorije. Prva popravka teorijske vrednosti za Ridbergovu konstantu dobija se uzimanjem u obzir konačnog odnosa između mase jezgra i mase elektrona.



Slika 4.2.2 Uz definiciju redukovane mase: a) elektron, mase m koji kruži na konstantnom rastojanju oko jezgra mase M može se predstaviti kao kruto telo kod koga se mase m i M nalaze na konstantnom rastojanju r; b) centar rotacije krutog tela nalazi se u njegovom centru mase; c) rotacija krutog tela kod koga se nejednake mase nalaze na rastojanju r može se opisati kao rotacija tela mase μ (u μ je redukovana masa) po krugu radijusa r.

Poznato je da osa rotacije krutog tela prolazi kroz njegov centar mase. Isto tako je poznato da se kruto telo može dovesti u indiferentnu ravnotežu ako se njegov centar mase (zapravo težište koje se u homogenom gravitacionom polju poklapa sa njim) poklapa se tačkom oslonca, Slika 4.2.2. U takvim uslovima, momenti sile koji deluju na različitim stranama tačke oslonca su jednaki:

$$m_1 r_1 g = m_2 r_2 g \tag{4.2.19}$$

ili:

$$\frac{m_1}{m_2} = \frac{r_2}{r_1}. \tag{4.2.20}$$

Kretanje elektrona oko jezgra po kružnoj orbiti radijusa r možemo shvatiti kao rotaciju krutog tela koje se sastoji od dve tačkaste mase, M i m, na konstantnom rastojanju r. Tada elektron i jezgro jednovremeno rotiraju istom ugaonom brzinom, ω, oko zajedničkog centra mase koji se nalazi na rastojanju r_n od jezgra i r_e od elektrona, pri čemu je $r_n + r_e = r$. Prema analogiji sa krutim telom jednačina (4.2.20) ovde važi:

$$\frac{m}{M} = \frac{r_n}{r_e} \tag{4.2.21}$$

odakle dobijamo radijuse putanja elektrona i jezgra:

$$r_n = \frac{m}{m+M}\, r \tag{4.2.22}$$

$$r_e = \frac{M}{m+M}\, r\,. \tag{4.2.23}$$

Sada na ovaj sistem primenjujemo drugi Borov postulat:

$$m\upsilon r = n\hbar\,. \tag{4.2.24}$$

Kako imamo dve mase, m i M, koje kruže oko zajedničkog centra perifernim brzinama υ_e i υ_n na rastojanjima r_e i r_n, respektivno, ukupan moment količine kretanja (na koji se odnosi Borov uslov kvantiranja), jednak je zbiru nuklearnog i elektronskog momenta:

$$L = L_e + L_n = n\hbar \tag{4.2.25}$$

$$L_e = m\upsilon_e r_e = m\omega r_e^2 \tag{4.226}$$

$$L_n = M\upsilon_n r_n = M\omega r_n^2 \tag{4.2.27}$$

$$L = \omega(m r_e^2 + M r_n^2)\,. \tag{4.2.28}$$

Nas ne zanimaju relativna rastojanja elektrona i jezgra od centra mase pa ih se, koristeći relacije (4.2.22) i (4.2.23), u izrazu (4.2.28) možemo osloboditi:

$$L = \omega r^2 \left[m\frac{M^2}{(m+M)^2} + M\frac{m^2}{(m+M)^2} \right]. \tag{4.2.29}$$

Izvlačenjem ispred zagrade proizvoda $m \cdot M$, sabiranjem razlomaka i skraćivanjem dobijamo:

$$L = \omega r^2 \frac{mM}{m+M}. \tag{4.2.30}$$

Uvođenje nove promenljive μ:

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \text{ ili } \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \tag{4.2.31}$$

najzad se dobija:

$$L = \omega r^2 \mu. \tag{4.2.32}$$

Poređenjem ovog izraza sa jednačinom (4.2.28) dobijamo važnu relaciju:

$$\mu r^2 = m r_e^2 + M r_n^2. \tag{4.2.33}$$

Promenljiva μ naziva se redukovanom masom. Pojam redukovane mase ima veliki značaj zbog toga što se rotacija krutog tela sa dve tačkaste mase M i m, na konstantnom rastojanju, r, može predstaviti kao rotacija tačkaste mase μ po kružnoj putanji r, kao što se vidi iz poslednje jednačine. Drugim rečima, kretanje elektrona i jezgra oko zajedničkog centra mase može se opisati istim jednačinama koje su izvedene za slučaj da je masa jezgra beskonačna, s tim što se u izrazima masa elektrona zamenjuje redukovanom masom. Na primer, ako želimo da izračunamo rotacionu kinetičku energiju jezgra i elektrona koji kruže oko zajedničkog centra mase imamo:

$$T = T_e + T_n$$

$$T = \frac{m\upsilon_e^2 + M\upsilon_n^2}{2} \tag{4.2.34}$$

$$T = \omega \frac{m r_e^2 + M r_n^2}{2}. \tag{4.2.35}$$

Zamenom izraza u brojiocu po relaciji (4.2.33) konačno dobijamo:

$$T = \frac{1}{2} \mu r^2 \omega^2 \tag{4.2.36}$$

što je ekvivalentno izrazu (uz $\omega r = \upsilon$) za kinetičku energiju elektrona koji kruži oko jezgra beskonačno velike mase, jednačina (4.2.4). Prema tome, vidimo da uvođenjem redukovane mase sve (do sada) izvedene jednačine za atom vodonikovog tipa važe uz zamenu $m \to \mu$:

$$r_n = 4\pi\varepsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{Ze^2\mu} \tag{4.2.37}$$

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \tag{4.2.38}$$

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$R_\mu = \frac{\mu e^4}{64\pi^3\varepsilon_0^2 c\hbar^3}. \tag{4.2.39}$$

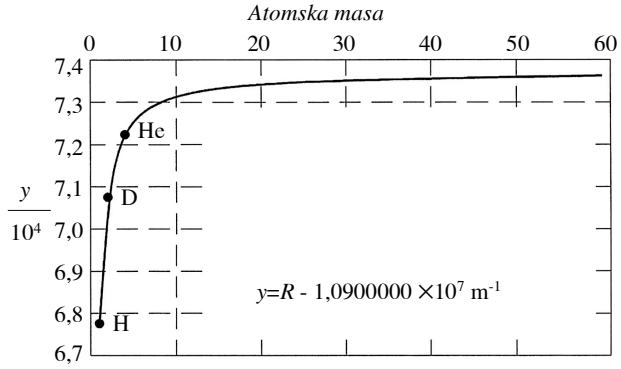
Zato što Ridbergova konstanta zavisi od redukovane mase, jednačina (4.2.39), a ova opet od mase jezgra, jednačina (4.2.31), očigledno je da će konstanta za različite atome vodonikovog tipa biti neznatno različita:

$$\frac{R_\mu}{R_\infty} = \frac{\mu}{m} = \frac{1}{1 + \dfrac{m}{M}} \tag{4.2.40}$$

ili:

$$R_\mu = \frac{R_\infty}{1 + \dfrac{m}{M}}. \tag{4.2.41}$$

Ovaj odnos je grafički prikazan na Slici 4.2.3 gde se vidi da R_μ postaje praktično nezavisno od mase jezgra za M = 20 a.j.m. Uočljiva je izrazita zavisnost Ridbergove konstante od mase jezgra pri manjim masama. Na primer, za atom vodonika $R_\mu^H = 109678\ \text{cm}^{-1}$ a za atom deuterijuma, koji ima dvostruko veću masu, $R_\mu^D = 109709\ \text{cm}^{-1}$.



Slika 4.2.3 Zavisnost Ridbergove konstante od mase atomskog jezgra.

Upoređujući vrednost za Ridbergovu konstantu, $R_\mu = 1{,}0967758 \times 10^7\ m^{-1}$ sa eksperimentalnom, $R = 1{,}09677576 \times 10^7\ m^{-1}$ vidimo da postoji slaganje na sedam značajnih cifara. Ovakvo slaganje nesumnjivo ukazuje na ispravnost Borovih postulata i na valjanost Borove teorije kada je reč o spektrima atoma vodonikovog tipa. Na primer, primenom izraza (4.3.41) na atom vodonika moguće je spektroskopski odrediti odnos mase protona (jezgra atoma vodonika) i mase elektrona:

$$\frac{M_p}{m_e} = 1836,\ 15. \tag{4.2.42}$$

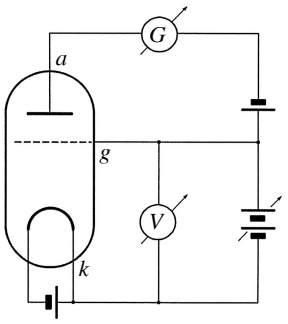
To je, takođe, ohrabrilo istraživače da kvantitativno tumače spektre atoma vodonikovog tipa što je neposredno dovelo do dva značajna rezultata – otkrića deuterijuma, Odeljak 4.4.1, i pravilnog tumačenja spektara zvezda, Odeljak 4.4.2.

4.3 FRANK-HERCOVI OGLEDI

4.3.1 Pobuđivanje atoma sudarima – određivanje energije pobuđivanja (ekscitacije)

Prema Borovoj teoriji, moguća energijska stanja atoma su diskretna, a atom emituje foton energije hv prelazeći iz kvantnog stanja više energije E_n u kvantno stanje niže energije E_m (Borov uslov frekvencije):

$$hv = E_n - E_m.$$



Slika 4.3.1 Šematski prikaz Frank-Hercovog ogleda. Struja se meri galvanometrom G. Sa *a* je označena anoda, *g* je rešetka a *k* katoda koja se neposredno greje pomoćnim izvorom napona.

Potvrda ovog (i drugih Borovih postulata) bila je objašnjenje spektra vodonikovog atoma pomoću Borovog modela atoma. Međutim, ispravnost Borove teorije može da se potvrdi i eksperimentima u kojima se proučavaju sudari elektrona sa određenim atomima. Ovakve eksperimente još 1913. godine izvodili su Dž. Frank i G. Herc (James Franck, 1882–1964; Gustav Hertz, 1887–1975), što im je 1925. donelo Nobelovu nagradu za fiziku. Eksperimenti Franka i Herca imali su u svoje vreme ogroman značaj jer su omogućili neposredno određivanje Plankove konstante h.

Principijelna šema Frank-Hercovog eksperimenta prikazana je na Slici 4.3.1. Tri elektrode (katoda, anoda i rešetka, odnosno mrežica) smeštene su u cevi u kojoj se nalazi živina para pri pritisku od 1 mm Hg. Elektroni koje emituje usijana katoda ubrzavaju se električnim poljem koje postoji između katode i rešetke i pri tome stiču kinetičku energiju, $T\ (= eU)$. Jačina polja može da se menja promenom napona (U) između katode i rešetke (na primer, od 0 do 30 V). Anoda na kojoj se skupljaju elektroni i koja je vezana za galvanometar kojim se meri struja, ima za 0,5 V niži potencijal od potencijala rešetke. To znači, da u prostoru između rešetke i anode vlada za elektrone usporavajuće električno polje. Krećući se od katode ka mrežici elektroni se sudaraju sa atomima žive pri čemu gube kinetičku energiju. Zbog toga do anode dolaze samo

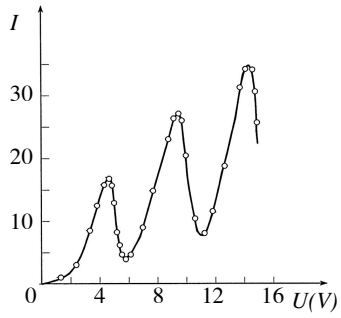
elektroni sa energijom većom ili jednakom od energije usporavajućeg polja između mrežice i anode, u ovom slučaju 0,5 *eV*. Zavisnost jačine električne struje koja prolazi kroz galvanometar od napona koji je uspostavljen između katode i mrežice ima oblik kao na Slici 4.3.2.

Kako se sa slike vidi, s porastom napona struja u početku jednolično raste, pa pri nekoj određenoj vrednosti napona dostiže maksimum. Posle toga struja opada i dostiže minimum, a zatim opet raste, itd. Minimum struje pri određenoj vrednosti napona pokazuje to da najveći broj elektrona nema dovoljno energije, jer su je izgubili u sudarima sa atomima žive, da pređe put na kojem vlada usporavajuće polje, od mrežice do anode.

Energija elektrona pri elastičnim sudarima sa atomima žive (u elastičnim sudarima atomi žive preuzimaju od elektrona energiju u obliku kinetičke, pa za ovaj tip sudara važe zakoni o održanju kinetičke energije i impulsa) praktično se ne menja zbog velike razlike u masama partnera koji se sudaraju, pa je pad struje posledica neelastičnih sudara elektrona i atoma žive. U neelastičnim sudarima sa elektronima, primljenu energiju atom žive pretvara u neki oblik svoje unutrašnje energije. Kako se minimumi struje zapažaju pri određenim vrednostima napona između katode i mrežice, npr. 4,9 *V* ili 9,8 *V*, zaključujemo da atomi žive u neelastičnim sudarima „preuzimaju" od elektrona energiju koja je prosti umnožak iznosa od 4,9 *eV*. Apsorbujući ovu tačno određenu energiju atomi žive se pobuđuju i prelaze u više energijsko stanje (više kvantno stanje). Na osnovu položaja minimuma struje zaključujemo da energije ekscitacije (pobeđivanja) atoma žive, koja se definiše kao razlika energije pobuđenog (kvantnog) stanja i osnovnog stanja u kojem se atomi žive normalno nalaze, iznosi 4,9 *eV*. Takođe, sledi da su elektroni sposobni za neelastični sudar s atomima samo ako imaju energiju jednaku (ili veću) od energije pobuđivanja najnižeg (pobuđenog) kvantnog stanja. Tako se iz toka krive vidi da struja jednolično raste do napona od 4,9 *V*, što znači da elektroni sa energijama nižim od 4,9 *eV* trpe samo elastične sudare. Pri naponu od 4,9 *V* struja opada, jer izvestan broj elektrona gubi svu svoju energiju u neelastičnim sudarima, pa ne može da pređe put od rešetke do anode, na kojem vlada usporavajuće polje. Kada je energija elektrona znatno veća od 4,9 *eV*, tada oni i posle neelastičnog sudara zadržavaju dovoljnu količinu energije da pređu put mrežica – anoda, pa struja opet počinje da raste.

Svi elektroni koji su, pri određenoj vrednosti ubrzavajućeg napona, pretrpeli neelastični sudar stižu na anodu sa istom energijom, nezavisno od vrednosti energije koju su u trenutku sudara imali, što može da se pokaže na sledeći način: pretpostavimo da je potencijal katode 0, potencijal anode V_A i da je rešetka uklonjena. Neka elektron pretrpi neelastični sudar na mestu na kojem je potencijal V_x. Preostaje mu energija e $(V_x\text{-}V_E)$, gde je eV_E karakteristična energija koju je elektron predao atomu žive. Potencijalna razlika na preostalom putu do anode je $(V_A\text{-}V_x)$, pa se energija elektrona uvećava do vrednosti:

$$e(V_x\text{-}V_E) + e(V_A\text{-}V_x) = e(V_A\text{-}V_E)$$



Slika 4.3.2 Zavisnost struje od ubrzavajućeg napona između katode i rešetke u Frank-Hercovom ogledu. Struje su reda veličine *nA*.

Kao što smo pokazali, ova energija ne zavisi od mesta na kojem se dogodio prvi neelastični sudar. Ukoliko je ubrzavajući potencijal dovoljno visok, elektron na svom putu može da pretrpi više neelastičnih sudara, pa otuda periodično pojavljivanje maksimuma (i minimuma). Tako struja drugi put počinje da opada pri vrednosti napona od 9,8 *V* – elektroni ubrzani potencijalnom razlikom od 9,8 *V* mogu da pretrpe neelastični sudar sa atomima žive dva puta, a u svakom pojedinom sudaru gube energiju od 4,9 *eV*.

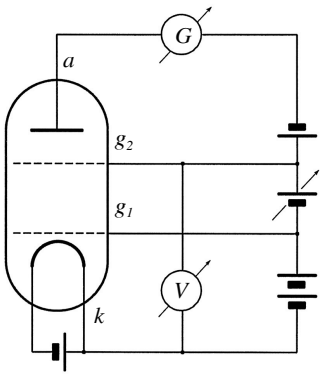
Iz eksperimenta sledi da je vrednost energije od 4,9 *eV* bitna karakteristika atoma žive i ona predstavlja prvi potencijal pobuđivanja žive ili tačnije energiju potrebnu da atom žive pređe iz osnovnog u prvo pobuđeno kvantno stanje. Prema Borovom postulatu, očekujemo da pobuđeni atom žive posle kratkog vremena (oko 10^{-8} sekundi) pređe u osnovno stanje uz emisiju kvanta energije:

$$E_n - E_m = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 4.9eV \Rightarrow \lambda = 2530\,\text{Å}$$

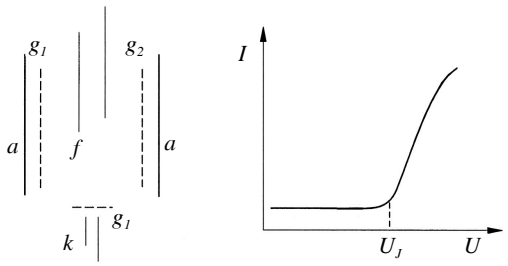
(*h* je Plankova konstanta, λ talasna dužina, ν frekvencija, a *c* brzina svetlosti). I ovo očekivanje su potvrdili Frank i Herc koji koji su spektrografom detektovali zračenje iz cevi talasne dužine 2537 Å a zatim na osnovu ove vrednosti talasne dužine odredili i Plankovu konstantu *h*.

Sistematsko određivanje energije pobuđivanja, odnosno ekscitacionih potencijala različitih kvantnih stanja vrši se, takođe, primenom metode elektronskih sudara. Za ovakva merenja koristi se savršenija eksperimentalna tehnika. Glavni nedostatak prethodne aparature bila je nemogućnost razdvajanja bliskih maksimuma. Proračuni pokazuju to da oblik krive zavisi od veličine pada potencijala na dužini srednjeg slobodnog puta *l*, odnosno od proizvoda *l* grad(*U*) [grad(*U*)=*dU*/*dx*]. Ukoliko je ova veličina manja, maksimumi su oštriji, bolje mogu da se odrede kritični potencijali i bolje je razdvajanje bliskih energija pobuđivanja. Međutim, ako je *l grad*(*U*) malo, tada ne mogu da se odrede energije viših stepena ekscitacije. Ovaj nedostatak Frank i Herc izbegli su i aparaturu izmenili tako da su se elektroni ubrzavali u jednom delu aparature, a sudarali se sa ispitivanim atomima u drugom delu. Bilo je dovoljno da se za ovo uvede još jedna rešetka g_1, na malom rastojanju od katode *k*, u poređenju s veličinom srednjeg slobodnog puta elektrona.

Na putu *k*-g_1 elektroni stiču celokupnu energiju, a ne gube je u sudarima jer je u ovoj oblasti vrlo nizak pritisak. Sudari se dešavaju u prostoru između dve rešetke g_1 i g_2. U ovoj oblasti ili nema električnog polja ili je ono takvo da omogućuje blagi porast energije elektrona. Između rešetke g_2 i anode, kao i u prethodnom slučaju, postoji usporavajuće električno polje, Slika 4.3.3. Za određivanje viših ekscitacionih potencijala treba da se podesi i pritisak gasa. Pritisci treba da budu niži. Ovo je važno jer je pri višem pritisku broj elastičnih sudara elektrona sa atomima veliki tako da gubici energije elektrona u ovim procesima nisu više zanemarljivi. Pri dovoljno niskom pritisku i dovljno visokom ubrzavajućem naponu, postoji mogućnost da se pobude i viša energijska stanja u atomu. Međutim, vrednosti potencijala dobijene neposredno eksperimentalnim putem, ne daju stvarne vrednosti ekscitacionih potencijala jer nije isključena mogućnost da elektroni predaju atomima energiju u dva ili više sudara, tako da tumačenje maksimuma, dobijenih eksperimentalnim putem, nije jednostavno.



Slika 4.3.3 Aparatura za određivanje viših potencijala ekscitacije. Elektroni praktično svu kinetičku energiju stiču na putu između katode *k* i prve rešetke g_1, a sudaraju se sa atomima žive u prostoru između g_1 i g_2.

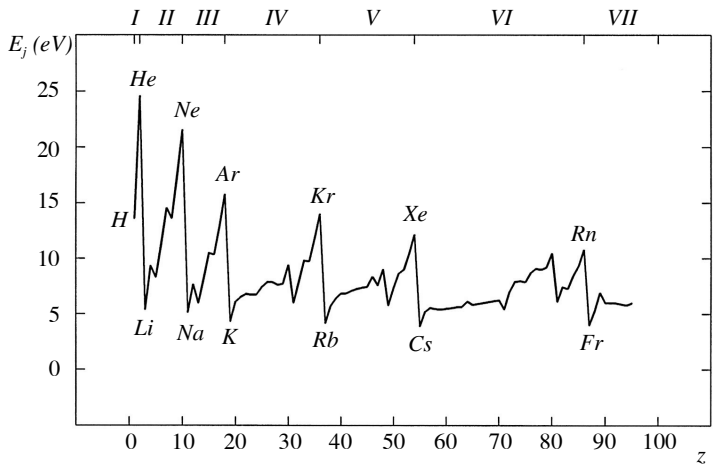


Slika 4.3.4 Aparatura za određivanje potencijala jonizacije; (levo) aparatura je u svemu slična onoj prikazanoj na Slici 4.3.1 osim što sadrži mrežicu g_2; (desno) zavisnost termoelektronske struje nastale emisijom elektrona sa vlakna *f* od ubrzavajućeg napona između katode, *k* i mrežice g_1. Sa U_j je označen potencijal jonizacije.

4.3.2 Određivanje energije jonizacije

Na osnovu prethodno opisanih eksperimenata mogu da se odrede energije ekscitacije atoma, dakle razlike u energijama različitih kvantnih stanja. Apsolutne vrednosti energija kvantnih stanja, E_1, E_2, ... dobijaju se određivanjem energija jonizacije atoma koja je definisana kao energija koju treba dodati da bi se elektron koji ima najmanju energiju veze u atomu (njih obično nazivamo perifernim ili spoljašnjim) potpuno udaljio iz atoma. Postoje različite metode za određivanje jonizacionih potencijala. U Hercovoj metodi, korišćen je uređaj koji se sastoji od katode *k*, rešetke g_1 cilindrične rešetke g_2 i cilindrične anode *a*. Dodavanjem elektrode *f*, ovaj uređaj, koji je korišćen prvenstveno za određivanje energija ekscitacije, mogao je da se upotrebi i za određivanje energije jonizacije, Slika 4.3.4. U ovom eksperimentu rešetka g_2 spaja se s anodom (čime se one dovode na isti potencijal) i uspostavlja se potencijalska razlika između elektrode *f* (koja se zagreva) i rešetke g_2. Elektroni emitovani termoemisijom sa vlakna *f* izdvajaju se na anodi, a galvanometrom G meri se jačina termoelektronske struje. Pokazano je da jačina termoelektronske struje raste s porastom jačine struje kojom se zagreva vlakno *f* ali samo do određene granice, posle koje porast struje prestaje. Pri velikim jačinama struje grejanja, oko vlakna *f* obrazuje se oblak elektrona koji sprečava dalji izlazak elektrona iz vlakna. Struja bi dalje rasla samo ako bi se smanjilo negativno naelektrisanje oko vlakna *f*, na primer, zbog rekombinovanja elektrona i pozitivnih jona nastalih u interakciji elektrona, emitovanih sa katode *k* i ubrzanih u prostoru *k*-g_1, i molekula gasa koji se nalazi unutar cilindrične rešetke g_2. Možemo, dakle, da zaključimo da bi zbog nastajanja pozitivnih jona u aparaturi, odmah porastao termoelektronski tok između *f* i g_2. Zato se i uspostavljenim naponom između katode *k* i mrežice g_1 (koji može da se menja) elektroni ubrzavaju do energije koja je dovoljna da izazove jonizaciju prisutnog gasa. Iz krive zavisnosti jačine termoelektronske struje od napona između ka-

tode, k i mrežice g_1, Slika 4.3.4 (desno), može da se odredi energija jonizacije prisutnih atoma (molekula) gasa.



Slika 4.3.5 Jonizacioni potencijal za elemente do rednog broja 93.

Na Slici 4.3.5 prikazan je prvi jonizacioni potencijal (energija potrebna da se iz neutralnog atoma udalji spoljašnji elektron) u zavisnosti od rednog broja elementa. Kao što se vidi, jonizacioni potencijal predstavlja tipičnu periferijsku osobinu atoma, pa, prema tome, periodično zavisi od rednog (atomskog) broja elementa.

Najveće vrednosti jonizacionih potencijala imaju atomi inertnih gasova, dok alkalni atomi imaju najniže vrednosti potencijala jonizacije. Do sada smo govorili o prvim jonizacionim potencijalima koji se odnose na energije koje su potrebne za oslobađanje jednog elektrona iz neutralnog atoma. Međutim, važno je da se odrede i vrednosti energija potrebnih da se udalje sukcesivno drugi, treći... elektron iz odgovarajućeg jona. Za proučavanje uzastopnih stepena jonizacije i za određivanje prirode pozitivnih jona primenjuju se metode masene spektrometrije. Pošto se masenim spektrometrom određuje odnos naelektrisanja prema masi ne/M, jon sa naelektrisanjem $\pm n$ odgovara masi M/n (jer je $ne/M=e/M/n$).

4.4 SISTEMI SLIČNI ATOMU VODONIKA

Izvanredno slaganje Borove teorije sa eksperimentima na vodonikovom atomu jasno je ukazalo na to da se ona može primeniti i za opisivanje sistema sličnih atomu vodonika. U početku, to se odnosilo na sisteme kod kojih oko atomskog jezgra kruži jedan elektron, znači, izotope vodonika, jedanput jonizovanog helijuma, He^+, dva puta jonizovanog litijuma, Li^{++}, itd. Kasnije se primena Borove teorije proširila i na druge sisteme koji se sastoje od dve čestice čija je energija uzajamnog privlačenja obrnuto proporcionalna rastojanju među njima odnosno na sve sisteme koji se mogu svesti na navedenu dvočestičnu interakciju. Postoje brojni sistemi koji ispunjavaju taj uslov: pored deuterijuma i jednoelektronskih jona (koji su među prvima bili razmatrani), to su tricijum, mionijum, pozitronijum, mionski atomi, Ridbergovi atomi, itd. Ovi sistemi se mogu kvantitativno ispitati primenom Borove teorije jednostavnom zamenom konstanti, mase i naelektrisanja odgovarajućih čestica od kojih je sistem izgrađen, u formulama izvedenim za atom vodonika. U ovom odeljku opisaćemo nekoliko zanimljivih sistema koristeći Borov model atoma. Neki sistemi su na ovaj način prvi put identifikovani (deuterijum, He^+) dok za druge (na

primer, Ridbergove atome) analiza po Borovom modelu predstavlja najjednostavniji način za opisivanje i predviđanje nekih njihovih osnovnih osobina.

4.4.1 Izotopi vodonika

Po osobinama, vodoniku su najsličniji njegovi izotopi, deuterijum i tricijum. U tim atomima proton (jezgro atoma vodonika) je zamenjen jezgrom koje ima isto naelektrisanje ali koje pored protona poseduje neutrone – jedan neutron kod deuterijuma i dva neutrona kod tricijuma. Tako je masa jezgra deuterijuma približno $2M_p$ a masa jezgra tricijuma $3M_p$ (M_p – masa protona). Tada, s obzirom na to da je $m/Mp \ll 1$ (m – masa elektrona), jednačina (4.3.42), tačan izraz za redukovanu masu, μ (4.3.31):

$$\mu = \frac{mM}{M+m} = \frac{m}{1+\frac{m}{M}} \tag{4.4.1a}$$

može se pisati u približnom obliku, kao:

$$\mu \approx m\left(1-\frac{m}{M}\right). \tag{4.4.1b}$$

[Jednačina (4.4.1b) je dobijena razvijanjem izraza (4.4.1a) u Tejlorov red u okolini $(m/M) \approx 0$; zadržan je samo prvi član razvoja kojim se za $(m/M) \ll 1$ sasvim dobro aproksimira originalna funkcija (4.4.1a)]. Iz ove formule nalazimo da je redukovana masa za atom vodonika:

$$\mu_H \approx m\left(1-\frac{m}{M_p}\right). \tag{4.4.1c}$$

za atom deuterijuma:

$$\mu_D \approx m\left(1-\frac{m}{2M_p}\right) \tag{4.4.1d}$$

i za atom tricijuma:

$$\mu_T \approx m\left(1-\frac{m}{3M_p}\right). \tag{4.4.1e}$$

S obzirom na to da je $m \ll M_p$ očigledno je da su redukovane mase vodonika, deuterijuma i tricijuma veoma bliske i da se mogu bez velike greške zameniti masom samog elektrona, m. Ove male razlike (reda 0,1%) se mogu zaista zanemariti ako se posmatraju i upoređuju opšte osobine atoma kao što su radijus atoma, jednačina (4.2.37), i energija jonizacije, jednačina (4.2.38); vidimo da su obe veličine praktično iste za atom vodinika i njegove izotope. Međutim, preciznost spektroskopskih merenja dovoljno je velika da se razlike od 0,1% sa lakoćom mogu uočiti i meriti. Kako je pokazano u prethodnom odeljku, za atom vodonika postignuto je slaganje

između izmerene i izračunate Ridbergove konstante na sedam značajnih cifara, dakle sa greškom približno hiljadu puta manjom od razlika koje se javljaju zbog promene mase atomskog jezgra. To znači da male razlike u redukovanim masama za izotope vodonika, mogu spektroskopski da budu opažene što je svojevremeno iskorišćeno za otkriće deuterijuma.

Potraga za deuterijumom počela je nakon otkrića neutrona, 1932. godine. Njegovo postojanje u prirodnom vodoniku ranije je indirektno utvrđeno na osnovu razlike od 0,02% među vrednostima za atomsku masu vodonika dobijenu hemijskim metodama i masenospektrometrijski. Koncentracija deuterijuma u prirodnom vodoniku bila je previše niska da bi mogao da se opazi masenom spektrometrijom ali i dovoljno visoka da promeni atomsku masu određenu hemijskim metodama. (Danas je poznato da prirodna rasprostranjenost deuterijuma iznosi 0,0156 %.) Godine 1932. Juri (H. C. Urey) je, sa saradnicima, propuštajući električno pražnjenje kroz gasoviti vodonik dobijen uparavanjem 3 l tečnog vodonika na zapreminu do 1 ml u Balmerovoj H_β liniji na 4861,326 Å pronašao novu malu komponentu talasne dužine 4860,000 Å čiji je položaj tačno odgovarao izotopu sa masom 2. Za to otkriće, zapravo otkriće deuterijuma, Juri je 1934. godine dobio Nobelovu nagradu za hemiju.

4.4.2 Jednoelektronski joni

Jednoelektronski jon ima istu strukturu kao atom vodonika s tom razlikom što atomsko jezgro ima naelektrisanje $+Ze$ i masu M. Promena mase jezgra utiče samo na redukovanu masu sistema i saglasno jednačini (4.4.1b) taj uticaj opada sa porastom mase jezgra. Promena redukovane mase ne utiče bitno na osnovne osobine sistema (radijus i energiju jonizacije) zbog čega u spektrima dolazi samo do neznatnog pomeranja linija kako je već opisano kod deuterijuma.

Porast naelektrisanja jezgra mnogo je važniji i u velikoj meri utiče na promenu osobina jednoelektronskih jona u odnosu na osobine vodonikovog atoma. Porast naelektrisanja jezgra dovodi do porasta elektrostatičke interakcije jezgro-elektron. Posledica toga je smanjenje Borovog radijusa jona i porast energije jonizacije. U odeljku 4.2 našli smo da radijus Borovog atoma opada sa porastom naelektrisanja jezgra, u jednačini (4.2.11):

$$r_n = 4\pi\varepsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{Ze^2m} = r_H \frac{n^2}{Z}, \qquad n = 1, 2, \ldots \tag{4.4.2a}$$

ili:

$$r_1 = \frac{r_H}{Z} \tag{4.4.2b}$$

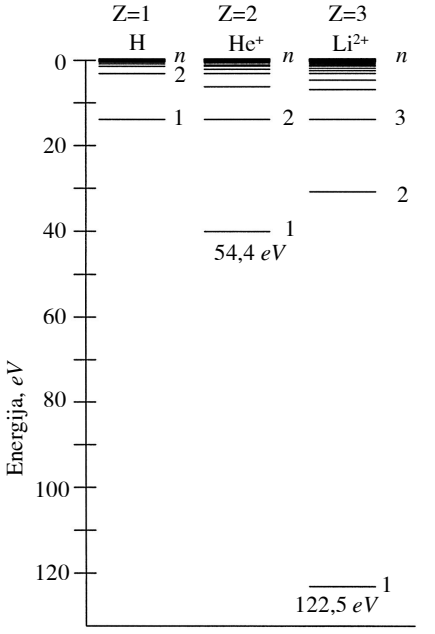
a da energija vezivanja elektrona (stoga i energija jonizacije) raste sa kvadratom naelektrisanja atomskog jezgra, u jednačini (4.2.13):

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2} = E_0\frac{Z^2}{n^2}, n = 1,2,\ldots \tag{4.4.3a}$$

ili: $$E_j = E_0 \ddot{Z}^2 . \qquad (4.4.3b)$$

Znači, vodoniku slični joni manji su od atoma vodonika što se moglo i očekivati s obzirom na jače privlačenje elektrona i jezgra. Mnogo važniji je porast energije vezivanja i energije jonizacije sa porastom naelektrisanja jezgra. Zbog kvadratne zavisnosti energije od naelektrisanja dolazi do brzog porasta energije jonizacije i do pomeranja spektralnog domena, u kome joni emituju ili apsorbuju zračenje, u ultraljubičastu oblast a za dovoljno veliko naelektrisanje jezgra i u oblasti *x*-zračenja.

Na Slici 4.4.1 dat je uporedni pregled energijskih nivoa, prema jednačini (4.4.3a) za atom vodonika i jone He^+ i Li^{++}.



Slika 4.4.1 Energijski nivoi atoma vodonika, *H* i njemu sličnih jona, jedanput jonizovanog helijuma, He^+, i dva puta jonizovanog litijuma, Li^{++}.

Pored brzog pada energije osnovnog nivoa sa porastom naelektrisanja sa Slike 4.4.1 se može uočiti to da pri nekim vrednostima glavnog kvantnog broja n_H, n_{He}, i n_{Li}, energije u sva tri sistema, zanemarujući razlike u redukovanim masama, postaju međusobno jednake. Ovo je lako objasniti pomoću izraza (4.4.3a). Pošto energija zavisi od odnosa $(Z/n)^2$ to se stanja sa istom energijom mogu postići pri različitim vrednostima Z i n za koje je njihov odnos konstantan. Na primer, jon sa naelektrisanjem $Z_{jon.}\, e$ i glavnim kvantnim brojem $n_{jon.}$ ima istu energiju kao i atom vodonika kada je:

$$\left(\frac{Z}{n}\right)_H^2 = \left(\frac{Z}{n}\right)_j^2$$

ili s obzirom na to da je $Z_H = 1$:

$$n_j = Z_j n_H . \qquad (4.4.4)$$

Jednačina (4.4.4) pokazuje uslov da energija jona bude jednaka energiji atoma vodonika u stanju sa glavnim kvantnim brojem n_H. Neka se atom vodonika nalazi u sledećem, višem kvantnom stanju definisanom kvantnim brojem n_H+1. Saglasno uslovu (4.4.4) posmatrani jon istu energiju postiže kada mu je glavni kvantni broj $n_{j.} = Z_j \cdot (n_H+1) = n_j + Z_j$. Dakle, kada se za vodonik kvantni broj promeni za jedinicu, za posmatrani jon kvantni broj se menja za Z_j, tj. između dva susedna vodonikova nivoa postoji $Z_j - 1$ nivoa jona čije je naelektrisanje Z_j. Zbog toga je, prividno, broj energijskih nivoa kod jednoelektronskih jona Z puta veći.

Relativna promena položaja energijskih nivoa kod vodoniku sličnih jona odražava se i na njihove spektre. Prvo, kratkotalasne granice spektralnih serija pomeraju se ka manjim talasnim dužinama (odnosno ka višim frekvencijama). Drugi očigledan efekt je porast broja spektralnih linija u posmatranom spektralnom području u odnosu na vodonikov spektar. Oba efekta su direktna posledica porasta naelektrisanja atomskog jezgra i u direktnoj su vezi sa porastom energije vezivanja elektrona i opisanom prividnom porastu broja energijskih nivoa. Pre pojave Borove teorije ovi efekti nisu bili očigledni te su stoga mnogi spektri pogrešno interpretirani.

U okviru Borove teorije ove efekte je lako objasniti. Balmerovu formulu za spektralne serije atoma vodonika (4.2.17):

$$\tilde{\nu} = R_H\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right) \quad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad k = n+1, n+2, \ldots \tag{4.4.5a}$$

za jednoelektronske jone možemo pisati u opštem obliku kao:

$$\tilde{\nu} = R_j Z^2\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right) \quad n = 1, 2, 3, \ldots \quad k = n+1, n+2, \ldots \tag{4.4.5b}$$

gde je R_{jon}. Ridbergova konstanta za dati jon a Z redni broj elementa od koga jon potiče. Uvlačenjem rednog broja Z u zagradu, poslednji izraz možemo pisati u obliku ekvivalentnom onome za atom vodonika:

$$\tilde{\nu} = R_j\left(\frac{1}{(n/Z)^2} - \frac{1}{(k/Z)^2}\right) \quad n = 1, 2, 3, \ldots \quad k = n+1, n+2, \ldots \tag{4.4.5c}$$

U potpunoj analogiji sa energijskim nivoima, Slika 4.4.1, ekvivalentne spektralne serije dobijamo kada je ispunjen uslov (4.4.4). Odavde neposredno sledi da između svakog para susednih spektralnih linija atoma vodonika postoji Z-1 linija u spektru jednoelektronskih jona, tj. da je gustina spektra (broj linija u posmatranom spektralnom intervalu) kod jona Z puta veća.

Ovi efekti naročito su bili korisni pri tumačenju spektara zvezda, kojima po pravilu, glavni doprinos daju linije helijuma i vodonika. Kod He^+ jona nađene su sledeće serije:

I Lajmanova,

$$\tilde{\nu} = 4R_{He}\left(1 - \frac{1}{k^2}\right) \quad k = 2,3,\ldots; \tag{4.4.6a}$$

II Lajmanova,

$$\tilde{\nu} = 4R_{He}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{k^2}\right) \quad k = 3,4,\ldots; \tag{4.4.6b}$$

Faulerova,

$$\tilde{\nu} = 4R_{He}\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{k^2}\right) \quad k = 4,5,\ldots; \tag{4.4.6c}$$

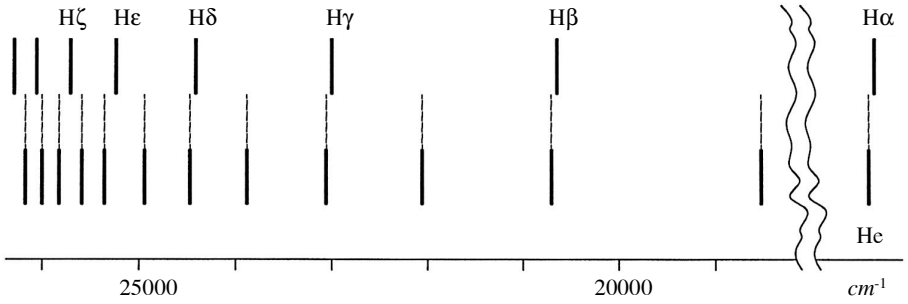
Pikeringova,

$$\tilde{\nu} = 4R_{He}\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{k^2}\right) \quad k = 5,6,\ldots; \tag{4.4.6d}$$

Ako izraz za Pikeringovu seriju napišemo kao i jednačinu (4.4.5c) (uz $Z^2=4$) imamo:

$$\tilde{\nu} = R_{He}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{(k/2)^2}\right) \quad k = 5,6,\ldots \quad . \tag{4.4.6}$$

Odavde je očigledno da se članovi serije sa parnim vrednostima k poklapaju sa linijama Balmerove serije vodonikovog atoma, Slika 4.4.2. Među njima postoji samo neznatna razlika zbog različitih redukovanih masa. U početku se smatralo da Faulerova serija u spektrima zvezda potiče od vodonika koji se u prisustvu helijuma nalazi u nekom posebnom stanju. Međutim, Bor je pretpostavio da serija potiče od jedanput jonizovanog helijuma, što je kasnije potvrđeno i eksperimentalno, snimanjem spektra čistog helijuma u laboratorijskim uslovima.



Slika 4.4.2 Spektralne serije vodonikovog atoma i helijumovog jona He^+: (gore) Balmerova serija atoma vodonika; (dole) Pikeringova serija He^+ jona.

4.5 BOROV MODEL I PRINCIP KORESPONDENCIJE

Princip korespondencije je univerzalni fizički princip koji je 1923. godine formulisao Bor:

Svaka nova fizička teorija koja opisuje fenomene van granica klasične fizike (u području velikih brzina – relativistička mehanika, u mikrosvetu – kvantna mehanika) kada se primeni na klasične objekte mora dati iste rezultate kao i klasična fizika.

Poznato je da se izrazi relativističke mehanike (koja opisuje fizičke pojave u sistemima koji se kreću brzinama bliskim brzini svetlosti), svode na klasične izraze ako se dopusti da se $\upsilon/c \to 0$. U kvantnoj mehanici, međutim, izrazi kojima se opi-

suju pojave u mikrosvetu ne mogu se tako lako svesti na klasične uglavnom zbog toga što mnoge pojave mikrosveta nemaju klasične analogone. U tom slučaju, s obzirom na to da važi isti princip, kaže se da svakoj klasičnoj veličini korespondira (odgovara) neka kvantno mehanička veličina. Tada, primenom kvantne mehanike na makroskopski problem korespondirajuće veličine postaju identične.

Primena principa korespondencije na Borovu teoriju atoma je posebno značajna zbog toga što daje logičku vezu između Borovih postulata (do kojih je on došao genijalnom intuicijom) i klasične elektrodinamike sa kojom su Borovi postulati u direktnoj suprotnosti.

Kako je već ranije pomenuto, klasična elektrodinamika predviđa da naelektrisanje koje se nalazi u ubrzanom kretanju (kružno kretanje je jedan oblik ubrzanog kretanja) mora kontinualno da emituje elektromagnetnu energiju. Primenjena na elektron koji kruži oko jezgra, klasična elektrodinamika predviđa da elektron treba da emituje elektromagnetne talase čija je frekvencija jednaka frekvenciji kruženja elektrona. S druge strane, prema Borovoj teoriji, elektron koji kruži po stacionarnoj orbiti ne emituje zračenje. Zračenje se emituje samo pri prelasku elektrona iz jedne stacionarne orbite u drugu.

Prema principu korespondencije ovi, u suštini protivurečeni stavovi biće identični ako se primene u uslovima koji odgovaraju klasičnim. Drugim rečima, Borova teorija, kao opštija, primenjena na atom u „klasičnim" uslovima mora dati rezultate identične onima koje daje klasična elektrodinamika. Uslove možemo smatrati „klasičnim" ako je promena energije elektrona (skok iz jedne orbite u drugu) zanemarljivo mala u odnosu na njegovu energiju, tj. $\Delta E/E_n \to 0$. Pod takvim uslovima promena energije u odnosu na ukupnu energiju može se smatrati kontinualnom – klasičnom:

$$lim\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{dE_n}{E_n} = d(\ln E_n) \to 0 \tag{4.4.7}$$

odakle zamenom Borovog izraza za energiju elektrona dobijamo:

$$lim\frac{\Delta E_n}{E_n} = 2\frac{\Delta n}{n} \to 0. \tag{4.4.8}$$

S obzirom na to da je minimalna vrednost Δn=1, relativna promena energije teži nuli ako glavni kvantni broj, n, teži beskonačnosti. Ovu činjenicu je intuitivno lako shvatiti sa dijagrama energijskih nivoa, Slika 4.1.2, iz koga se vidi da je sa porastom glavnog kvantnog broja energijska razlika među susednim nivoima sve manja, tj. $\Delta E/E \to 0$ sa porastom n.

Prema tome, saglasno principu korespondencije, frekvencija zračenja koje emituje elektron pri prelazu sa nivoa n na nivo k, pri čemu je $n, k \gg |n\text{-}k|$ treba da bude jednaka frekvenciji rotacije elektrona u nivou n ($\approx k$). Klasičnu frekvenciju obrtanja elektrona u nivou n, ν_{kl}, izračunavamo na osnovu njegove periferne brzine, υ_n, i radijus orbite, r_n:

$$2r_n\nu_{kl} = \upsilon_n \tag{4.4.9}$$

$$\nu_{kl} = \frac{\upsilon_n}{2\pi r_n} \tag{4.4.10}$$

$$\nu_{kl} = \frac{1}{32\pi^3\varepsilon_0^2}\,\frac{me^4}{n^3\hbar^3}. \tag{4.4.11}$$

Frekvenciju zračenja po Borovom modelu dobijamo pod uslovom da su kvantni brojevi n i k veliki, tj. $n, k \gg |n-k|$. Tada važi:

$$|n-k| = \Delta n \tag{4.4.12}$$

$$n+k = 2n \tag{4.4.13}$$

$$nk = n^2. \tag{4.4.14}$$

Iz (4.4.12) i (4.4.13) neposredno sledi da je:

$$|n^2-k^2| = |(n-k)(n+k)| = 2n\Delta n. \tag{4.4.15}$$

Tada se Ridbergova jednačina može pisati u obliku:

$$\nu_{kv} = \tilde{\nu}_{kv}c = R_\infty c\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{k^2}\right) = R_\infty c\frac{k^2-n^2}{n^2k^2} \tag{4.4.16}$$

odakle se zamenom razlike kvadrata iz brojioca po relaciji (4.4.15) i proizvoda u imeniocu po (4.4.14) dobija:

$$\nu_{kv} = \frac{R_\infty c 2n\Delta n}{n^4} = \frac{2R_\infty c\Delta n}{n^3}. \tag{4.4.17}$$

Izražavanjem Ridbergove konstantne, R_∞, po Borovom modelu, za Δn=1, dobijamo:

$$\nu_{kv} = \frac{1}{32\pi^3\varepsilon_0^2}\,\frac{me^4}{n^3\hbar^3} \tag{4.4.18}$$

odnosno:

$$\nu_{kl} = \nu_{kv}. \tag{4.4.19}$$

Prema tome, frekvencija zračenja elektrona koji prelazi iz kvantnog stanja u susedno, pri vrlo visokim kvantnim brojevima, n, jednaka je frekvenciji kruženja istog elektrona oko jezgra. Time je protivrečenost između Borove i klasične teorije uklonjena. Borova teorija kao opštija važi i za atomske i za makroskopske pojave dok klasična teorija može da se primeni samo na makroskopske pojave. Pri tome se kao kriterijum da li je pojava klasične ili kvantne prirode koristi relativni odnos ukupne energije i promene energije. Ako je promena energije veoma mala u po-

ređenju s ukupnom energijom onda se pojava može tumačiti i klasičnim kvantnim zakonima. Ako je, pak, promena energije približno jednaka energiji sistema, tada se za valjan opis mora koristiti kvantna teorija.

Najopštiji kriterijum za ocenu kome tipu sistema pripada, klasičnom ili kvantnom, je da se posmatra dejstvo u njemu. Ako su dimenzije sistema i mase čestica u njemu takve da je dejstvo po veličini uporedivo sa Plankovom konstantnom, $6{,}62 \times 10^{-34}$ Js, tada su pojave kvantne prirode. U slučaju da je dejstvo mnogo veće od Plankove konstantne tada se može smatrati da je h=0, diskretni karakter dejstva iščezava i pojava se može opisati klasičnim zakonima.

4.6 BOR-ZOMERFELDOVA TEORIJA

DODATAK 4.6

D-4.6.1 Moment impulsa – ugaoni moment

Impuls $\vec{p}$, tela mase, m, koje se kreće pravolinijski brzinom, $\vec{\upsilon}$, dat je izrazom:

$$\vec{p} = m\upsilon. \tag{D-4.6.1}$$

Krivolinijsko kretanje može se razložiti na kružno i pravolinijsko razlaganjem brzine na radijalnu i tangencijalnu:

$$\vec{p} = m(\vec{\upsilon}_r + \vec{\upsilon}_t).$$

Množenjem vektorski sleva radijusom krivine, $\vec{\upsilon}$, dobijamo:

$$\vec{r}\times\vec{p} = \vec{r}\times m\vec{\upsilon}_r + \vec{r}\times m\vec{\upsilon}_t.$$

Pošto je $\vec{r} \parallel \vec{\upsilon}_r$, to je i proizvod ta dva vektora jednak nuli, pa je:

$$\vec{r}\times\vec{p} = \vec{r}\times m\vec{\upsilon}_t.$$

Vektor $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = \vec{r}\times m\vec{\upsilon}_t$ naziva se moment impulsa (ili ugaoni moment). S obzirom na to da je $\vec{\upsilon}_t$ normalno na $\vec{r}$ apsolutna vrednost njihovog proizvoda jednaka je proizvodu njihovih apsolutnih vrednosti pa konačno imamo:

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = rm\vec{\upsilon}_t\vec{n} \tag{D-4.6.2}$$

gde je $\vec{n}$ jedinični vektor normalan na ravan u kojoj se telo kreće. Tangencijalna brzina, $\vec{\upsilon}_t$ može se izraziti preko ugaone brzine ω jednostavnom relacijom $\upsilon_t = r \cdot \omega$, ($\upsilon_t = ds/dt$ a $ds/r = d\theta$ pa je s obzirom na $ds = r \cdot d\theta$, $\upsilon_t = r \cdot d\theta / dt = r \cdot \omega$), tako da na kraju iz (D-4.6.2) dobijamo vrednost ugaonog momenta:

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = mr^2\omega\vec{n} \tag{D-4.6.3a}$$

ili u skalarnom obliku:

$$L = mr^2\omega . \qquad \text{(D-4.6.3b)}$$

Diferenciranjem izraza (D-4.6.3a) dobijamo:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{d(\vec{r}\times m\vec{\upsilon})}{dt} = \dot{\vec{r}}\times\vec{\upsilon} + \vec{r}\times m\dot{\vec{\upsilon}} .$$

S obzirom na to da je $\dot{\vec{r}} = \vec{\upsilon}$ imamo da je $\dot{\vec{r}}\times\vec{\upsilon} = 0$ odakle sledi $\dot{\vec{r}}$:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{r}\times m\dot{\vec{\upsilon}} . \qquad \text{(D-4.6.4)}$$

U potpunoj analogiji sa pravolinijskim kretanjem gde se sila definiše kao prvi izvod impulsa, kod kružnog kretanja definiše se moment sile, $\vec{M}$ kao prvi izvod momenta impulsa (ugaonog momenta):

$$\vec{M} = \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{r}\times m\dot{\vec{\upsilon}} \qquad \text{(D-4.6.5)}$$

ili s obzirom na to da je $\vec{a} = \dot{\vec{\upsilon}}$:

$$\vec{M} = \vec{r}\times m\vec{a} = \vec{r}\times\vec{F} \qquad \text{(D-4.6.6)}$$

gde je $\vec{F}$ sila. Ako je sila $\vec{F}$ centralna, tj., $\vec{F}\parallel\vec{r}$ tada je $\vec{r}\times\vec{F} = 0$ pa je:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = 0$$

takođe: $$L = const. \qquad \text{(D.4.6.7)}$$

Drugim rečima, pri kretanju pod uticajem centralnih sila ugaoni moment je konstantan i kretanje se odvija u jednoj ravni.

D-4.6.2 Energija tela u eliptičnoj putanji

Za opis ovog kretanja najbolje je izbarati polarni koordinatni sistem. Položaj tačke u ravni određuju dve polarne koordinate r i φ koje su sa Dekartovim *x, y* vezane relacijama, Slika D-4.6.1:

$$x = r\cos\varphi \qquad \text{(D.4.6.8)}$$

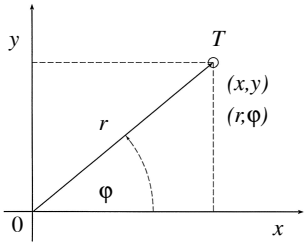
$$y = r\sin\varphi .$$

Kinetička energija u Dekartovim koordinatama izražava se u obliku:

$$T = T_x + T_y \qquad \text{(D.4.6.9a)}$$

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) . \qquad \text{(D.4.6.9b)}$$

Kinetičku energiju u polarnim koordinatama nalazimo smenom koordinata iz (D-4.6.8) u (D-4.6.9b).



Slika D-4.6.1 Koordinate tačke T u ravni mogu se ekvivalentno izraziti bilo u Dekartovim *(x,y)*, bilo u polarnim koordinatama (r,φ). Transformacija iz jednih koordinata u druge izvodi se pomoću (D-4.6.8).

Diferenciranjem izraza (D-4.6.8) dobijamo:

$$\dot{x} = \dot{r}\cos\varphi - r\sin\varphi\dot{\varphi} \qquad \text{(D-4.6.10)}$$

$$\dot{y} = \dot{r}\sin\varphi + r\cos\varphi\dot{\varphi}\,.$$

Zamenom (D-4.6.10) u (D-4.6.9b) dobijamo izraz za kinetičku energiju izraženu u polarnim koordinatama:

$$T = \frac{1}{2}m\left\{\left[\dot{r}\cos\varphi - (r\sin\varphi)\dot{\varphi}\right]^2 + [\dot{r}\sin\varphi + (r\cos\varphi)\dot{\varphi}]^2\right\}$$

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2)\,. \qquad \text{(D-4.6.11)}$$

Treba uočiti to da dve komponente kinetičke energije mogu da se pridruže radijalnom i tangencijalnom kretanju, tj.:

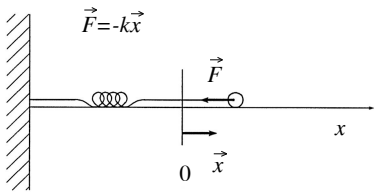
$$T = T_r + T_t\,. \qquad \text{(D-4.6.12)}$$

D-4.6.3 Harmonijski oscilator

Iz Hukovog zakona sledi da je elastična sila $\vec{F}$, proporcionalna pomeranju, $\vec{x}$, i da deluje u suprotnom pravcu od njega, Slika D-4.6.2:

$$\vec{F} = -k\vec{x} \qquad \text{(D-4.6.13)}$$

gde je k konstanta elastičnosti.



Slika D-4.6.2 Linearni harmonijski oscilator.

Elastična sila $\vec{F}$ telu mase m sa otklonom x_0 od ravnotežnog položaja saopštava ubrzanje $\vec{a}$ pa je saglasno izrazu (D-4.6.13):

$$\vec{F} = m\vec{a} = -k\vec{x}. \qquad \text{(D-4.6.14)}$$

Prelaskom u skalarni oblik (s obzirom na to da su $\vec{a}$ i $\vec{x}$ paralelni) uz $a = d\upsilon / dt = \dot{\upsilon} = \ddot{x} = d^2x/dt^2 = \ddot{x}$ dobijamo:

$$m\ddot{x} + kx = 0 \qquad \text{(D-4.6.15)}$$

$$\ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0.$$

Ovo je linearna diferencijalna jednačina drugog reda koju smo rešavali u odeljku D-2.2.4 a čije opšte rešenje ima oblik:

$$x = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t) \qquad \text{(D-4.6.16)}$$

uz:

$$\omega^2 = \frac{k}{m}. \qquad \text{(D-4.6.17)}$$

Partikularno rešenje dobijamo iz početnog uslova da je pri $t = 0$ telo imalo otklon x_0. Pošto je otklon maksimalan znači i da je za $t = 0 \quad dx/dt = 0$. Tada je:

$$x_0 = A\sin 0 + B\cos 0 = B$$

$$\dot{x} = A\omega\cos(\omega t) - B\omega\sin(\omega t)$$

$$\dot{x}(0) = A\omega\cos 0 - B\omega\sin 0 = 0 \quad \Longrightarrow$$

$$A = 0$$

i konačno:

$$x(t) = x_0\cos(\omega t). \qquad \text{(D-4.6.18)}$$

Impuls p_x:

$$p_x = m\dot{x} = -mx_0\omega\sin^2(\omega t). \qquad \text{(D-4.6.19)}$$

Kinetička energija, T:

$$T = \frac{1}{2}m\upsilon^2 = \frac{p_x^2}{2m} = \frac{1}{2}mx_0^2\ \omega^2\sin^2(\omega t). \qquad \text{(D-4.6.20)}$$

Potencijalna energija, U, jednaka je radu koji izvrši spoljašnja sila da telo prenese iz ravnotežnog položaja $(x = 0, U = 0)$ u proizvoljni položaj x:

$$dA = dV = Fds = kxdx.$$

(Sila koja vrši rad deluje nasuprot elastičnoj sili.):

$$U = \int_0^x kxdx = k\frac{x^2}{2}\Big|_0^x = \frac{kx^2}{2} = \left(\frac{k}{2}\right)x_0^2\cos^2(\omega t).$$

S obzirom na to da je $k = m\omega^2$ [izraz (D-4.6.17)] najzad dobijamo:

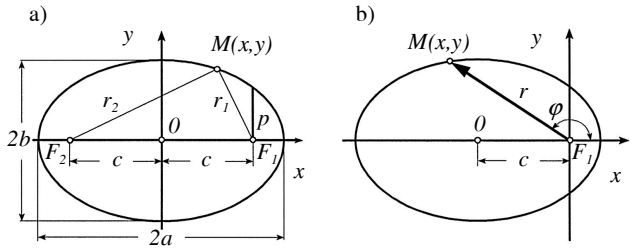
$$U = \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2\ \cos^2\ (\omega t). \qquad \text{(D-4.6.21)}$$

Ukupna energija, E:

$$E = U + T = \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2\ [\ \cos^2(\omega t) + \sin^2(\omega t)\ ]$$

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2\ . \qquad \text{(D-4.6.22)}$$

D-4.6.4 Jednačina elipse u pravougaonim i polarnim koordinatama



Slika D-4.6.3 Elipsa i njeni parametri: a) u Dekartovom sistemu; b) u polarnom koordinatnom sistemu.

Elipsa je geometrijsko mesto tačaka za koje je suma rastojanja od dve zadate tačke (fokusa) konstantna, Slika D-4.6.3a:

$$r_1 + r_2 = 2a. \qquad \text{(D-4.6.23)}$$

Svako od fokalnih rastojanja F_1 i F_2 (fokalni radijus vektor tačke elipse s apscisom x) izražava se formulom:

$$r_1 = a - \varepsilon x$$

$$r_2 = a + \varepsilon x \qquad \text{(D-4.6.24)}$$

gde je a velika poluosa elipse, ε njen ekscentritet:

$$\varepsilon^2 = 1 - \frac{b^2}{a^2} \qquad < 1 \qquad \text{(D-4.6.25)}$$

i b mala poluosa elipse. Iz poslednjeg izraza nalazimo odnos male i velike poluose:

$$\frac{b}{a} = \sqrt{1 - \varepsilon^2}\,. \qquad \text{(D-4.6.26)}$$

Fokusi elipse, F_1 i F_2, leže na velikoj osi elipse s obe strane centra, O, na rastojanju c:

$$c = \sqrt{a^2 - b^2}\,. \qquad \text{(D-4.6.27)}$$

Fokalni parametar, p, predstavlja polovinu tetive koja prolazi kroz jedan fokus a koja je paralelna sa malom poluosom:

$$p = \frac{b^2}{a}\,. \qquad \text{(D-4.6.28)}$$

Kada se ose elipse poklapaju sa koordinatnim osama tada je kanonička jednačina elipse oblika:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1. \qquad \text{(D-4.6.29)}$$

U polarnim koordinatama najjednostavniju jednačinu elipse dobijamo tako što centar koordinatnog sistema postavimo u jedan njen fokus (dakle, pomerimo je za c po apscisi), Slika D-4.6.3b. Tada je jednačina elipse (D–4.6.29) oblika:

$$\frac{(x + c)^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \qquad \text{(D-4.6.30a)}$$

ili s obzirom na to da je:

$$\frac{c}{a} = \varepsilon \qquad \text{(D-4.6.30b)}$$

$$\left(\frac{x}{a} + \varepsilon\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 = 1.$$

Odnos među koordinatama *(x, y)* i (r, φ) je isti kao ranije, jednačine (D-4.6.8). Uočimo li da je:

$$a = \frac{p}{1-\varepsilon^2} \tag{D-4.6.31}$$

$$b^2 = \frac{p^2}{1-\varepsilon^2} \tag{D-4.6.32}$$

transformacijom koordinata prema jednačinama (D-4.6.8) nalazimo:

$$\frac{x}{a} = \frac{r}{p}(1-\varepsilon^2)\cos\varphi;\ \frac{y}{b} = \frac{r}{p}\sqrt{(1-\varepsilon^2)}\sin\varphi\ .$$

Zamenom ovih odnosa u jednačinu (D-4.6.30b) dobijamo kvadratnu jednačinu po r čija su rešenja:

$$r_{1/2} = \frac{p(-\varepsilon\cos\varphi \pm 1)}{1-\varepsilon^2\cos^2\varphi}.$$

S obzirom na to da r mora biti pozitivno uzimamo rešenje sa pozitivnim znakom pa dobijamo:

$$r = \frac{p(1-\varepsilon\cos\varphi)}{(1+\varepsilon\cos\varphi)(1-\varepsilon\cos\varphi)} \tag{D-4.6.33a}$$

$$r = \frac{p}{1+\varepsilon\cos\varphi}.$$

Najzad, oslobodimo li se fokalnog parametra pomoću izraza (D-4.6.31) nalazimo da je jednačina elipse u polarnim koordinatama:

$$r = \frac{a(1-\varepsilon^2)}{1+\varepsilon\cos\varphi}. \tag{D-4.6.33b}$$

Borova teorija koja se odlikovala smelošću i jednostavnošću dala je odgovore na mnoga važna pitanja u vezi sa spektrima i strukturom atoma vodonikovog tipa, ali je već u prvom pokušaju da objasni neke druge pojave zapala u ozbiljnu krizu. Na primer, njome nije mogao da se objasni Zemanov efekt (tj. cepanje spektralnih linija u magnetnom polju). Isto tako, iz Borove teorije nije bilo moguće ni naslutiti zašto se spektralni prelazi među izvesnim nivoima odigravaju a među drugima ne.

Istovremeno, oni koji su verovali u ispravnost Borovog pristupa nastojali su da poboljšaju Borovu teoriju i da je učine prikladnom i za opisivanje drugih pojava. Najlogičnije poboljšanje Borovog planetarnog modela atoma, u potpunoj analogiji sa rotacijom planeta oko Sunca, je dopuštanje mogućnosti da se elektron kreće po eliptičnim orbitama. Takav model razvio je A. Zomerfeld (Arnold Johannes Wilhem Somerfeld, 1868–1951) i na osnovu njega došao do zaključka da spektralne linije iz

spektara vodonikovog tipa moraju imati finu strukturu. Na njegov zahtev Fridrih Pašen je vrlo pažljivo ispitao spektralnu liniju helijuma talasne dužine $\lambda = 4686\mathring{A}$ (koja odgovara prelazu sa n=4 na n=3) i uočio to da se linija sastoji od 13 bliskih linija. Slaganje sa predviđanjima Zomerfelda bilo je zapanjujuće, tako da je taj uspeh bio upoređivan sa proračunima Leverijea (Leverrier) i Adamsa (Adams) na osnovu kojih je predviđeno postojanje planete Neptun pre nego što je ona zaista i opažena. Kasnije se pokazalo da je fina struktura spektralnih linija sasvim druge prirode i da je Zomerfeldova teorija u osnovi pogrešna. (Međutim, pošto je to jedina teorija iz koje se poreklo i priroda kvantnih brojeva može intuitivno razumeti mi ćemo je ipak detaljnije razmotriti.)

4.6.1 Harmonijski oscilator

Vilson (W. Wilson) i Zomerfeld (A. Sommerfeld) su nezavisno pronašli metod za kvantizaciju akcionih integrala (integrala dejstva) klasične mehanike. Potreban uslov za primenu te metode je to da su svaka generalisana koordinata q_k i njoj pridruženi moment p_k periodične funkcije vremena. Tada je integral dejstva u jednom periodu kretanja kvantovan, tj.:

$$\oint p_k dq_k = n_k h. \tag{4.6.1}$$

Za ilustraciju razmotrićemo jednodimenzioni harmonijski oscilator za koji su generalisana koordinata i impuls $x = x_0 \cdot \cos(\omega t)$ i $p_x = -mx_0\omega \cdot \sin(\omega t)$, respektivno. Primenom uslova za kvantovanje integrala dejstva dobijamo:

$$nh = \int_0^T p_x dx = \int_0^T m x_0^2\, \omega^2 \sin^2(\omega t) dt = m\omega x_0^2 \int_0^T \sin^2(\omega t) d(\omega t) = \tag{4.6.2}$$

$$= m\omega x_0^2 \oint_0^{2\pi} \sin^2\theta \, d\theta \quad \Rightarrow \quad nh = m\omega\pi x_0^2.$$

Prema tome, dobijamo da su amplitude oscilovanja kvantovane:

$$x_0^2 = \frac{nh}{\pi m\omega} \tag{4.6.3}$$

kao i energijska stanja:

$$E = \frac{1}{2} m\omega^2 x_0^2 = n\omega\hbar = nh\nu \tag{4.6.4}$$

$$n = 0,1,2,\ldots$$

Klasična i stara kvantna teorija, koja se upravo ovde izlaže, pogrešno pripisuju osnovnom stanju energije oscilatora vrednost nula (E= 0 za n=0). Međutim, obe daju ispravno rastojanje među susednim energijskim nivoima.

Iz oscilatornih nivoa, međutim, nema podataka o tome koji prelazi su najverovatniji, odnosno koji prelazi su zabranjeni. Ovi podaci se direktno dobijaju iz nove kvantne mehanike u okviru pravila izbora. U staroj kvantnoj teoriji ova pravila se delom mogu dobiti promenom Borovog principa korespondencije poređenjem osobina sa osobinama klasičnog oscilatora. Tako, pošto klasični oscilator emituje samo jednu fekvenciju (a ne i harmonike), sledi da je pravilo odabiranja za kvantni oscilator, $\Delta n = \pm 1$.

Dvodimenzioni harmonijski oscilator možemo smatrati superpozicijom dva ortogonalna jednodimenziona oscilatora koji osciluju po pravcima x i y. Tada su energijski nivoi dati zbirom energija za x i y oscilacije:

$$E(n_x, n_y) = \hbar(n_x\omega_x + n_y\omega_y). \tag{4.6.5a}$$

Ako je oscilator izotropan, tj. $k_x = k_y$ tada je $\omega_x = \omega_y = \omega$

i: $$E_n = n\hbar\omega \tag{4.6.5b}$$

gde je n=n_x+n_y. Međutim, za n=1 sada imamo ne jedno već dva stanja ($n_x = 0$, n_y =1 i n_x=1, $n_y = 0$) koja imaju istu energiju. Za takva stanja se kaže da su **degenerisana**. Uopšte, nivo energije, E_n, dvodimenzionog, izotropnog, oscilatora je (n+1)-put degenerisan. Slično, energija n-tog nivoa trodimenzionog izotropnog oscilatora, takođe, data je izrazom $E_n = n \cdot hv = n \cdot \hbar\omega$, gde je $n = n_x + n_y + n_z$ pri čemu je degeneracija (n+1)(n+2)2.

Može se reći da stepen degeneracije predstavlja broj načina na koji se može realizovati izvesno energijsko stanje, E_n, definisano kvantnim brojem, n. Kod izotropnog trodimenzionog oscilatora gde je $n = n_x + n_y + n_z$ svakom kombinacijom kvantnih brojeva n_x, n_y i n_z, čiji je zbir n, realizuje se stanje, tačnije skup stanja, sa jednom te istom energijom, E_n. Stepen degeneracije energijskog stanja, E_{n3}, trodimenzionog, izotropnog oscilatora najlakše izračunavamo tako što posmatramo uticaj porasta dimenzionalnosti na degeneraciju. Kako je već rečeno, energijski nivoi jednodimenzionog oscilatora nisu degenerisani pošto se svako energijsko stanje može realizovati samo na jedan način. Kod dvodimenzionog, izotropnog oscilatora kvantni broj n_2 je linearna kombinacija kvantnih brojeva n_x i n_y($n_2 = n_x + n_y$). Pošto za dato n_2 kvantni broj n_x može imati ukupno $n_2 + 1$ različitih vrednosti ($n_x = 0, 1, 2, \ldots n_2$) to je i degeneracija sistema n_2+1. (I kvantni broj n_y ima n_2+1 vrednosti, s tim što one zavise od veličine kvantnog broja n_x, tj. n_y= $n_2 - n_x$.) Dodamo li na ovaj slučaj i kretanje u trećoj dimenziji, definisano novim kvantnim brojem, n_z, imamo da je $n_3 = n_x + n_y + n_z = n_2 + n_z$. Ako posmatramo određeno energijsko stanje definisano kvantnim brojem n_3 tada je stepen degeneracije iz njega izvedenog dvodimenzionog stanja definisanog kvantnim brojem n_2 zavisan od veličine kvantnog broja n_z s obzirom na to da je $n_2 = n_3 - n_z$. Znači, za $n_z = 0$ izvedeni dvodimenzioni sistem je $n_3 + 1$ puta degenerisan, za $n = 1$ degeneracija je n_3, za n_z=2 degeneracija je n_3-1, itd. U opštem slučaju degeneracija pomoćnog dvodimenzionog sistema je $n_3 - n_z + 1$. Ukupnu degeneraciju trodimenzionog sistema nalazimo sabiranjem po n_z svih mogućih dvodimenzionih stanja, pri čemu n_z može imati vrednosti od 0 do n_3:

$$N_3 = \sum_{n_z=0}^{n_3} (n_3 - n_z + 1) = (n_3 + 1) \sum_{n_z=0}^{n_3} 1 - \sum_{n_z=0}^{n_3} n_z = \frac{1}{2}(n_3 + 1)(n_3 + 2).$$

Međutim, ako se oscilator učini anizotropnim, tj. $E_{nx} \neq E_{ny} \neq E_{nz}$ za $n_x = n_z$ svako energijsko stanje može se realizovati samo na jedan jedini način zavisno od kombinacije kvantnih brojeva n_x, n_y i n_z. Različite energije E_{nx}, E_{ny}, E_{nz} za $n_x = n_y = n_z$ s obzirom na relaciju (4.6.4) podrazumevaju da su i osnovne frekvencije ν_x, ν_y i ν_z međusobno različite. Samerljivost ovih osnovnih frekvencija može da se iskoristi kao pogodan kriterijum za ocenu degeneracije sistema. (Frekvencije su samerljive ako se jedna od njih može izraziti kao celobrojni umnožak druge.) **Degeneracija sistema se uklanja ako frekvencije pojedinih oblika kretanja definisanih sopstvenim kvantnim brojevima, nisu samerljive**. U sistemu koji nije degenerisan, određeno energijsko stanje može se postići samo jednom kombinacijom kvantnih brojeva.

Pitanje degeneracije stanja i njenog uklanjanja može se formulisati i na sledeći način. Degeneracija u nekom sistemu koji se može opisati sa više kvantnih brojeva delimično ili potpuno se uklanja pojavom novog oblika periodičnog kretanja čija je frekvencija nesamerljiva sa frekvencijama postojećeg kretanja. Kao što će se videti, kod Zomerfeldovog modela atoma vodonika, čija se energijska stanja mogu opisati sa tri kvantna broja, n, n_φ i m degeneracija po kvantnom broju n_φ se uklanja tako što se uzima u obzir rotaciono kretanje orbite zbog relativističke promene mase a po m tako što se sistem unese u magnetno polje u kome orbite počinju da precesuju.

4.6.2 Atom vodonikovog tipa

Kretanje elektrona oko nepomičnog jezgra predstavlja specijalni slučaj kretanja u polju centralnih sila, tj. sila čiji pravac delovanja sve vreme prolazi kroz jednu tačku, a čija veličina predstavlja samo funkciju rastojanja od ove tačke.

Razmatramo kretanje elektrona koji kruži oko jezgra s naelektrisanjem $+Ze$ i masom mnogo većom od mase elektrona, $m/M \approx 0$, tako da se centar mase nalazi u jezgru. Između jezgra i elektrona deluje Kulonova privlačna sila pa je potencijalna energija elektrona u polju jezgra:

$$U = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}. \tag{4.6.6}$$

Ovo kretanje je identično kretanju planeta oko Sunca gde je potencijalna energija planeta data sličnim izrazom ali je prouzrokovana delovanjem ne elektrostatičke već gravitacione sile. (Zato se i označava kao Keplerov problem.) Za ovakvo kretanje važi zakon o održanju energije i zakon o održanju ugaonog momenta pa su ukupna energija sistema, E, i ugaoni moment, $\vec{L}$ konstante:

$$E = T + U$$

(D-4.6.11) $$T = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2)$$

$$E = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \tag{4.6.7}$$

i:

$$L = mr^2\dot{\varphi}\,. \tag{4.6.8}$$

Nas ne zanima neposredna zavisnost ugla, φ i radijus vektora, r, od vremena već samo njihova uzajamna veza. Stoga ćemo se pogodnim zamenama iz prethodne dve jednačine osloboditi svih izvoda po vremenu. Iz izraza (4.6.8) dobijamo:

$$\dot{\varphi} = \frac{L}{mr^2} \tag{4.6.9}$$

a iz pravila za diferenciranje složene funkcije:

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = \frac{dr}{d\varphi}\dot{\varphi}$$

uzimajući $\dot{\varphi}$ iz (4.6.9) dobijamo:

$$\dot{r} = \frac{dr}{d\varphi}\frac{L}{mr^2}\,. \tag{4.6.10}$$

Eliminisanjem izvoda po vremenu u izrazu za ukupnu energiju E zamenom (4.6.9) i (4.6.10) u (4.6.7) neposredno dobijamo:

$$\frac{m}{2}\left[\left(\frac{dr}{d\varphi}\right)^2\frac{L^2}{m^2r^4} + r^2\frac{L^2}{m^2r^4}\right] = E + \frac{l}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

i nakon sređivanja:

$$\frac{1}{r^4}\left(\frac{dr}{d\varphi}\right)^2\frac{L^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} = E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \tag{4.6.11}$$

Uvođenjem nove promenljive, ρ:

$$\rho = \frac{1}{r} \tag{4.6.12}$$

uz:

$$\frac{d\rho}{d\varphi} = \frac{d(1/r)}{d\varphi} = -\frac{1}{r^2}\frac{dr}{d\varphi} \tag{4.6.13}$$

dobijamo istu jednačinu u nešto pogodnijem obliku:

$$\left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right)^2 \frac{L^2}{2m} + \frac{L^2}{2m}\rho^2 = E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} Ze^2\rho \ . \tag{4.6.14}$$

Ova diferencijalna jednačina može se rešiti neposrednim integraljenjem nakon razdvajanja promenljivih. Međutim, ako je još jedanput diferenciramo možemo je svesti na posebno pogodan oblik:

$$\frac{d\rho}{d\varphi}\left[\frac{d^2\rho}{d\varphi^2}\frac{L^2}{m} + \frac{L^2}{m}\rho - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} Ze^2\right] = 0 \ . \tag{4.6.15}$$

Pošto u opštem slučaju $d\rho/d\varphi$ nije jednako nuli, to znači da je za rešenje jednačine potrebno da izraz u zagradi bude jednak nuli. Tada iz jednačine (4.6.15) dobijamo:

$$\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \rho = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{mZe^2}{L^2}. \tag{4.6.16}$$

Ovo je nehomogena diferencijalna jednačina drugog reda. Njena rešenja se dobijaju sabiranjem opšteg rešenja iz nje izvedene homogene jednačine:

$$\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \rho = 0 \tag{4.6.17}$$

i partikularnog rešenja nehomogene jednačine. Očigledno je to, da je jedno rešenje nehomogene jednačine (4.6.16):

$$\rho_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{mZe^2}{L^2}. \tag{4.6.18}$$

Opšte rešenje homogene jednačine, kao što smo videli kod harmonijskog oscilatora (D-4.6.16) je:

$$\rho_2 = A\cos\varphi + B\sin\varphi \tag{4.6.19}$$

A i B su konstante koje treba odrediti iz početnih uslova. Tako se opšte rešenje dobija u obliku:

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 \tag{4.6.20}$$

$$\rho = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{mZe^2}{L^2} + A\cos\varphi + B\sin\varphi. \tag{4.6.21}$$

Recimo da su početni uslovi zadati tako da je $\varphi = 0$ za minimalno r (tj. maksimalno ρ):

$$za\ \varphi = 0 \qquad \frac{d\rho}{d\varphi} = 0 \qquad \frac{d^2\rho}{d\varphi^2} < 0.$$

Izračunavanjem prvog i drugog izvoda iz opšteg rešenja dobijamo da je B=0 i A>0 pa je rešenje oblika:

$$\rho = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{mZe^2}{L^2} + A\cos\varphi \tag{4.6.22}$$

što predstavlja jednačinu elektronske orbite. Iz ove jednačine teško je prepoznati oblik orbite i odrediti njene osnovne parametre. Međutim, upoređivanjem ove jednačine sa jednačinom elipse u polarnim koordinatama koja je oblika:

(D-4.6.33a)
$$r = \frac{a(1-\varepsilon^2)}{1+\varepsilon\cos\varphi} \tag{4.6.23}$$

ili uzimanjem recipročne vrednosti:

$$\rho = \frac{1}{r} = \frac{1}{a(1-\varepsilon^2)} + \frac{\varepsilon}{a(1-\varepsilon^2)}\cos\varphi \tag{4.6.24}$$

uočava se značajna sličnost. Pri tome je kod elipse ε–ekscentricitet, a–velika poluosa i b – mala poluosa, pri čemu važi:

$$\varepsilon^2 = 1 - \frac{b^2}{a^2} \tag{4.6.25}$$

$$\frac{b}{a} = \sqrt{1-\varepsilon^2}. \tag{4.6.26}$$

(Ne mešati ekscentricitet ε, sa dielektričnom konsatnom, ε_0!!!). Na osnovu sličnosti našeg rešenja [jednačina (4.6.22)] i jednačine elipse (4.6.24), sledi:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{mZe^2}{L^2} = \frac{1}{a(1-\varepsilon^2)} \tag{4.6.27}$$

i:

$$A = \frac{\varepsilon}{a(1-\varepsilon^2)}. \tag{4.6.28}$$

Da bismo izrazili parametre orbite (a, b, ε) u funkciji osnovnih fizičkih veličina (E, e, Z, m, L, ...) izračunaćemo eksplicitno vrednost konstante A zamenom rešenja ρ,

jednačina (4.6.22) u originalnoj diferencijalnoj jednačini (4.6.14). Potražimo li prvi izvod jednačine (4.6.22):

$$\frac{d\rho}{d\varphi} = -A\sin\varphi \qquad \left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right)^2 = A^2\sin^2\varphi$$

i zamenimo ga u jednačini (4.6.14), nakon sređivanja dobijamo:

$$A = \sqrt{\frac{2mE}{L^2} + \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\left(\frac{mZe^2}{L^2}\right)^2}. \tag{4.6.29}$$

Uvrštavanjem (4.6.29) u (4.6.28) dobijamo:

$$A = \sqrt{\frac{2mE}{L^2} + \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\left(\frac{mZe^2}{L^2}\right)^2} = \frac{\varepsilon}{a(1-\varepsilon^2)}. \tag{4.6.30}$$

Sada iz jednačina (4.6.26), (4.6.27) i (4.6.30) lako izračunavamo parametre orbite. Deljenjem (4.6.30) sa (4.6.27) dobijamo:

$$1-\varepsilon^2 = -(4\pi\varepsilon_0)^2\frac{2EL^2}{mZ^2e^4} \tag{4.6.31}$$

a zamenom (4.6.31) u (4.6.30):

$$a = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2E}. \tag{4.6.32}$$

Najzad, zamenom (4.6.31) i (4.6.32) u (4.6.25):

$$b = \frac{L}{\sqrt{-2mE}}. \tag{4.6.33}$$

4.6.3 Bor-Zomerfeldovo kvantovanje

Energiju elektrona u eliptičnoj putanji neposredno dobijamo iz jednačine (4.6.32):

$$E = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2a}. \tag{4.6.34}$$

Iz ovog skupa kontinualnih vrednosti treba na osnovu pravila kvantovanja naći odgovarajuće dopuštene energijske nivoe.

U eliptičnoj orbiti elektron ima dva stepena slobode, koji odgovaraju nezavisnim koordinatama r i φ, pa je nepohodno primeniti dva kvantna uslova:

$$\oint p_r dr = n_r h \qquad \oint p_\varphi d\varphi = n_\varphi h. \tag{4.6.35}$$

Pri tome su p_r i p_φ impulsi pridruženi koordinatama r i φ, tj. radijalni i tangencijalni impuls ($p_\varphi = L$):

$$p_r = m\dot{r} \qquad p_\varphi = mr^2\dot{\varphi}. \tag{4.6.36}$$

Za kretanje u polju centralne sile $p_\varphi = L = \text{const.}$ te se iz integrala dejstva neposredno dobija:

$$n_\varphi h = \oint p_\varphi d_\varphi = p_\varphi \oint d_\varphi = p_\varphi \varphi\Big|_0^{2\pi} = 2\pi p_\varphi \Rightarrow \tag{4.6.37}$$

$$p_\varphi = L = n_\varphi \frac{h}{2\pi} = n_\varphi \hbar \tag{4.6.38}$$

n_φ je azimutni kvantni broj.

Primena kvantnog uslova za r zahteva prilično složena izračunavanja (u koje se nećemo ovde upuštati) na osnovu kojih se dobija:

$$1 - \varepsilon^2 = \frac{n_\varphi^2}{(n_r + n_\varphi)^2} \tag{4.6.39}$$

ili s obzirom na jednačinu (4.6.26):

$$\frac{b}{a} = \frac{n_\varphi}{n_r + n_\varphi}. \tag{4.6.40}$$

Zbir dva kvantna broja n_r i n_φ naziva se glavni kvantni broj, n:

$$n = n_r + n_\varphi \tag{4.6.41}$$

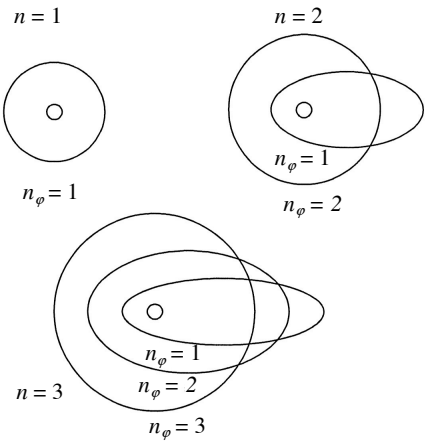
pa je:

$$\frac{b}{a} = \frac{n_\varphi}{n}. \tag{4.6.42}$$

Energiju sistema sada možemo dobiti kvadriranjem jednačine (4.6.42) i zamenom a^2 i b^2 iz jednačina (4.6.32) i (4.6.33) uz $L = n_\varphi \hbar$ [jednačina (4.6.38)]:

$$E = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \frac{mZ^2 e^4}{2n^2 \hbar^2}. \tag{4.6.43}$$

Vidimo, da bez obzira na postojanje dva kvantna uslova, dobijamo isti izraz za energiju elektrona kao i pri kretanju po kružnim orbitama. Energija zavisi samo od glavnog kvantnog broja n.



Slika 4.6.1 Elektronske orbite u vodoniku sličnom atomu prema Bor-Zomerfeldovom modelu. Kada je $n_\varphi = n$ orbite su kružnog oblika. Za $n_\varphi<n$ orbite su eliptične. Eliptičnost orbite zavisi od odnosa n_φ/n. Međutim, energija orbite zavisi samo od vrednosti glavnog kvantnog broja n. Atomsko jezgro se nalazi u žiži elipse.

Međutim, za datu vrednost n postoji više orbita sa različitim n_φ – energijska stanja su degenerisana. Pošto je $b/a = n_\varphi/n$ (4.6.42) i kako je $b<a$ sledi da je $(n_\varphi)_{max.}=n$. Isto tako, $b>0$ tj. $n_\varphi>0$ odakle proizlazi da se azimutalni kvantni broj, za dato n kreće od 1 do n: $n_\varphi = 1, 2, 3, ...n$. Zbog toga je svako stanje sa glavnim kvantnim brojem n, n-tostruko degenerisano. Za $n_\varphi<n$ orbite su eliptičnog oblika, dok za $n_\varphi = n$ dobijama kružne orbite, kao što je prikazano na Slici 4.6.1.

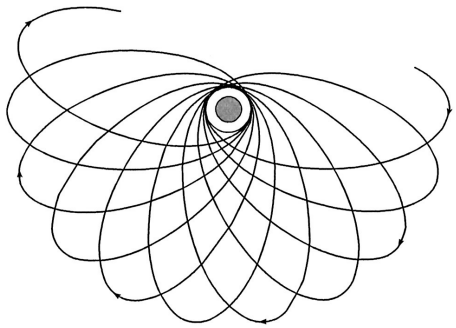
Energija elektrona, bez obzira na oblik orbite, zavisi samo od glavnog kvantnog broja, n, tj. orbite sa različitim ekscentricitetom su degenerisane. Na ovom mestu Zomerfeld je uveo relativističku korekciju za masu elektrona. Za orbitu sa velikim ekscentricitetom elektron prolazi pored jezgra veoma velikom brzinom, pa relativistička promena mase postaje primetna. Što je putanja elektrona bliža jezgru to je i njegova periferna brzina na tom delu putanje veća (III Keplerov zakon), pa time i relativistička promena mase. Promena mase elektrona utiče na lokalni oblik orbite zbog čega ona menja relativni ugao pri svakom obilasku elektrona oko jezgra. U dužem vremenskom intervalu gledano, orbita obrazuje rozetu kao što je prikazano na Slici 4.6.2. Sa takvom popravkom teorije, energijski nivoi su, umesto jednačine (4.6.43), dati približnim izrazom:

$$E_n = \frac{E_0 Z^2}{n^2}\left[1 + \frac{a^2 Z^2}{n}\left(\frac{1}{n_\varphi} - \frac{3}{4n}\right)\right] \tag{4.6.44a}$$

gde je E_0 energija elektrona u prvoj Borovoj orbiti H atoma a α **konsanta fine strukture**:

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{c\hbar} = 7{,}297\times10^{-3} \approx \frac{1}{137}. \tag{4.6.44b}$$

Ova konstanta je ime dobila otuda što je (numerički) ispravno objasnila fino cepanje linija vodonikovog spektra.



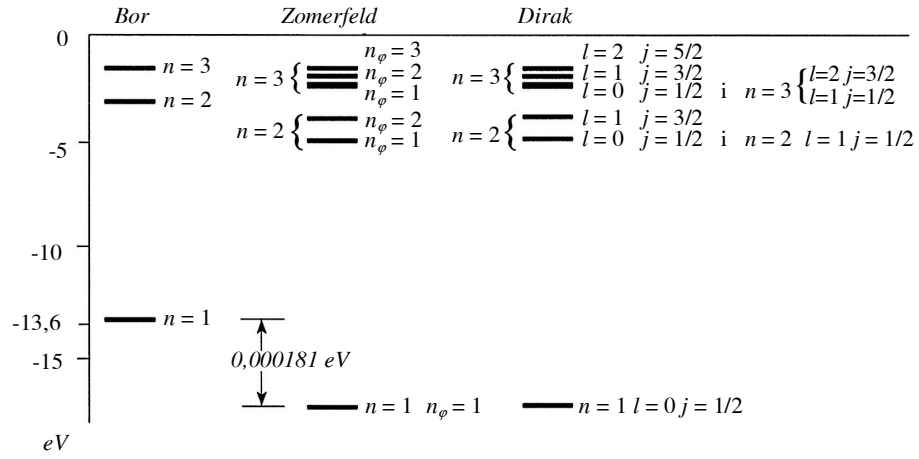
Slika 4.6.2 Zbog relativističke promene mase pri kretanju u blizini atomskog jezgra dolazi do promene oblika elektronske orbite. Pored rotacije elektrona po eliptičnoj orbiti, dolazi i do rotacije orbite oko njene žiže. Rotaciona frekvencija orbite, za dati glavni kvantni broj, n, zavisi od ekscentriciteta orbite, tj. od n_φ. Pošto orbite sa različitim kombinacijama kvantnih brojeva n i n_φ imaju različite frekvencije rotacije to će imati i različite energije. Tako, rotacija orbite oko žiže uklanja degeneraciju stanja. Posledica toga je pojava fine strukture u optičkim spektrima.

Uklanjanje degeneracije kod eliptičnih orbita najlakše je shvatiti u kontekstu pojave novog oblika periodičnog kretanja čija je frekvencija nesamerljiva sa frekvencijom postojećeg kretanja po elipsi. Naime, zbog relativističke promene mase, eliptičke orbite počinju da rotiraju oko atomskog jezgra, pri čemu frekvencija rotacije elipse kao celine nije samerljiva sa frekvencijom kruženja elektrona po elipsi. Frekvencija kruženja elektrona po elipsi zavisi samo od vrednosti glavnog kvantnog broja, n, dok frekvencija rotacije cele eliptične putanje zavisi od eksentriciteta elipse odnosno od odnosa n_φ/n. S obzirom na to da za dato n postoji niz vrednosti n_φ, svakoj od njih odgovara po jedna frekvencija rotacije elipse, odnosno svakom n_φ odgovara po jedno energijsko stanje. Drugim rečima, svakom energijskom stanju odgovara samo jedna kombinacija kvantnih brojeva n i n_φ – degeneracija je uklonjena.

S ozbirom na to da se energija stanja znatno manje menja sa promenom kvantnog broj n_φ nego sa promenom kvantnog broja n, to će se uklanjanje degeneracije zbog relativističke promene mase na postojeće energijske nivoe odraziti u vidu pojave fine strukture nivoa, saglasno jednačini (4.6.44). Na Slici 4.6.3 prikazan je odnos energijskih nivoa atoma vodonika dobijenih na osnovu Borove, Zomerfeldove i Dirakove teorije. Borova teorija, kako je već pokazano u poglavlju 4.4. i ne predviđa pojavu fine strukture energijskih nivoa. Zomerfeldova teorija pojavu cepanja elektronskih nivoa objašnjava relativističkom promenom mase elektrona u eliptičnim orbitama, dok Dirakova, koja uz male dopune i danas predstavlja najkompletniju sliku o strukturi atoma vodonika, pojavu fine strukture objašnjava kombinovanim relativističkim (spin) i talasnim osobinama elektrona. Interesantno je uočiti da postoji potpuno slaganje između broja i položaja energijskih nivoa po Zomerfeldovoj i po Dirakovoj teoriji. Naime, Dirak je za položaj energijskih nivoa dobio jednačinu istog oblika kao i Zomerfeld, s tom razlikom što je azimutni kvantni broj, n_φ zamenjen unutrašnjim kvantnim brojem j ($j=l+s$, $l=n_\varphi-1$, s – spinski kvantni broj, videti odeljak 4.8):

$$E_n = -\frac{E_0 Z^2}{n^2}\left[1 + \frac{a^2 Z^2}{n}\left(\frac{1}{j+{}^1\!/_2} - \frac{3}{4n}\right)\right]. \qquad (4.6.44c)$$

Nažalost, kvantitativno slaganje Zomerfeldove slike sa Dirakovom i sa izvedenim eksperimentima sasvim je slučajno. Zomerfeldovo objašnjenje fine strukture spektralnih linija vodonika i vodoniku sličnih atoma bilo je uspešno zbog toga što su se greške zbog zanemarivanja talasne prirode elektrona i zbog zanemarivanja postojanja spina elektrona uzajamno poništile! Uprkos tome, Zomerfeldov model je imao veliki značaj jer je uz njegovu pomoć bilo moguće objasniti čitav niz pojava, počevši od spektara alkalnih metala pa do pojave cepanja spektralnih linija u magnetnom polju.



Slika 4.6.3 Veza između položaja energijskih nivoa po predviđanjima Bora, Zomerfelda i Diraka. Odstupanja od Borovih energijskih nivoa uvećana su za faktor $(137)^2$.

4.6.4 Prostorno kvantovanje

Do sada smo posmatrali kretanje elektrona samo u jednoj ravni gde postoje dva stepena slobode koja možemo pridružiti koordinatama elektrona. Međutim, ako posmatramo realan slučaj, kretanje elektrona u prostoru, treba razmotriti tri stepena slobode pošto se prostorne koordinate opisuju sa tri nezavisne promenljive. Drugim rečima, treba uzeti u obzir i mogućnost da različite orbite sa kvantnim brojevima n i n_φ imaju različite orijentacije u prostoru. Zbog izotropije prostora (istovetnosti osobina u svim pravcima), različitim prostornim orijentacijama sa istim kvantnim brojevima n i n_φ odgovara jedna ista vrednost energije, pa se kaže da su stanja degenerisana. Ova degeneracija se javlja čak i ako se uzme u obzir relativistička promena mase elektrona. Ako se javi bilo kakav poremećaj koji uklanja izotropiju osobina, različite orijentacije mogu imati različite energije. Drugim rečima, poremećaj uklanja degeneraciju. Poremećaj izotropije prostora mora biti takav da utiče na elektron u orbiti. To može da bude električno ili magnetno polje. Na primer, kada se atom unese u magnetno polje, zbog postojanja magnetnog i mehaničkog momenta elektronske orbite, dolazi do precesije orbita, tj., do rotacije orbite kao celine oko spoljašnjeg magnetnog polja. Precesija je novi oblik periodičnog kretanja čija frekvencija nije samerljiva ni sa frekvencijom kruženja elektrona po orbiti niti, pak, sa frekvencijom kruženja eliptičnih orbita uzrokovanog relativističkom promenom

mase elektrona. Pojava novog oblika kretanja sa nesamerljivom frekvencijom u odnosu na frekvencije već postojećeg kretanja, kako je već naglašeno, uklanja degeneraciju.

Položaj elektrona u prostoru određuje se sa tri prostorne koordinate, r, θ i ψ kao što je prikazano na Slici 4.6.4:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\psi \\ y &= r\sin\theta\sin\psi \\ z &= r\cos\theta. \end{aligned} \tag{4.6.45}$$

U ovom slučaju kvantni uslovi dobijaju oblik:

$$\begin{aligned} \oint p_r dr &= n_r h \\ \oint p_\theta d\theta &= n_\theta h \\ \oint p_\psi d\psi &= n_\psi h. \end{aligned} \tag{4.6.46}$$

Impulsi pridruženi odgovarajućim koordinatama su:

$$\begin{aligned} p_r &= m\dot{r} \\ p_\theta &= mr^2\dot{\theta} \\ p_\psi &= m(r_{proj.})^2\dot{\psi} = mr^2\sin^2\theta\dot{\psi}. \end{aligned} \tag{4.6.47}$$

(Koordinatom ψ izražava se kretanje elektrona po projekciji orbite na ekvatorijalnu ravan dok se sa φ izražava ugaona koordinata za kretanje u prostornoj orbiti.) Prva dva kvantna uslova slična su onima koje smo imali kod opisivanja kretanja elektrona u ravni. Zbog toga ćemo ovde razmatrati samo impuls p_ψ. Sa Slike 4.6.4 se vidi da koordinata ψ karakteriše kretanje projekcije elektrona u ekvatorijalnoj ravni a njen odgovarajući impuls p_ψ predstavlja projekciju ukupnog momenta količine kretanja L na z-osu. Fizički, pravac ove ose može da se zada, na primer, beskonačno malim magnetnim poljem, u čijem pravcu delovanja definišemo z-osu. Lako je pokazati da je $p_\psi = const.$ služeći se istim argumentima kao i kod p_φ. Naime, pošto je $L = const.$, to znači da i njegova projekcija u izabranom pravcu mora, takođe, biti konsantna. Otuda kao i za p_ψ dobijamo:

$$\oint p_\psi d\psi = p_\psi \int_0^{2\pi} d\psi = 2\pi p_\psi = n_\psi h \tag{4.6.48}$$

$$p_\psi = n_\psi \hbar.$$

Znači, projekcije momenta impulsa (ugaonog momenta) na pravac polja imaju kvantovane vrednosti. Drugim rečima, orijentacija orbite u prostoru nije proizvoljna, već postoji diskretan niz mogućih orijentacija.

Kvantni broj n_ψ je uvek pozitivan, pošto se odnosi na apsolutnu vrednost projekcije orbitnog momenta. Međutim, projekcije mogu biti i negativne, tj. elektron može kružiti i u obrnutom smeru u odnosu na onaj koji smo do sada razmatrali. Zbog toga je celishodno uvesti novi kvantni broj, m, magnetni kvantni broj, koji može biti kako pozitivan tako i negativan:

$$\cos\alpha = \frac{p_\psi}{L} = \frac{m\hbar}{n_\varphi\hbar} = \frac{m}{n_\varphi}. \tag{4.6.49}$$

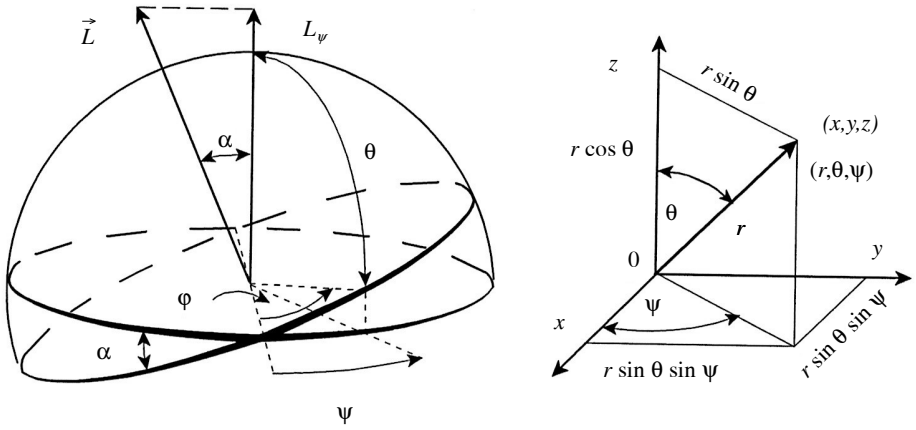
Drugim rečima, projekcija momenta impulsa (ugaonog momenta) je kvantovana i određena magnetnim kvantnim brojem, m, koji može imati vrednosti od n_φ do $+n_\varphi$:

$$p_{proj.} = m\hbar. \tag{4.6.50}$$

Neka je, na primer: $L = 1\cdot\hbar$; tada je $n_\varphi = 1$

$$\cos\alpha = \frac{m}{n_\varphi} = +1, 0, -1.$$

Prema tome, pri $n_\varphi = 1$ moguće su samo tri orijentacije orbite; pri $n = 2$ imamo pet takvih orijentacija ($m = 2, 1, 0, -1, -2$) ili uopšte za $n_\varphi = k$ imamo $2k + 1$ orijentacija orbite.



Slika 4.6.4 Uz određivanje koordinata elektrona u sfernom koordinatnom sistemu.

Sada ćemo pokazati da su dva novouvedena kvantna broja „ekvatorijalni", n_θ, i „polarni", n_ψ, jednostavnom relacijom povezani sa azimutnim kvantnim brojem n_φ:

$$n_\varphi = n_\theta + n_\psi. \tag{4.6.51}$$

Sa Slike 4.6.5 se vidi da između uglova θ, φ i ψ postoji veza:

$$(rd\varphi)^2 = (r\sin\theta d\psi)^2 + (rd\theta)^2 . \tag{4.6.52}$$

Ovo je očigledno ako pustimo da uglovi postaju beskonačno mali tako da sferni trougao može da se smatra ravanskim trouglom za koji na osnovu Pitagorine teoreme imamo gornju relaciju. Množeći izraz (4.6.52) sa *m/dt* dobijamo:

$$mr^2\frac{d\varphi}{dt}d\varphi = mr^2\sin^2\theta\frac{d\psi}{dt}d\psi + mr^2\frac{d\theta}{dt}d\theta$$

ili kompaktnije:

$$mr^2\dot{\varphi}d\varphi = mr^2\sin^2\theta\dot{\psi}d\psi + mr^2\dot{\theta}d\theta . \tag{4.6.53}$$

Integraljenjem izraza (4.6.53) po sferi dobijamo:

$$\oint mr^2\dot{\varphi}d\varphi = \oint mr^2\sin^2\theta\psi d\psi + \oint mr^2\dot{\theta}d\theta . \tag{4.6.54}$$

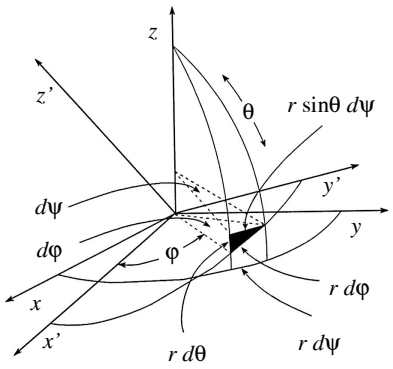
Odavde, poređenjem sa kvantnim uslovima:

$$\oint p_\varphi d\varphi = n_\varphi h, \quad \oint p_\theta d\theta = n_\theta h, \quad \oint p_\psi d\psi = n_\psi h$$

neposredno dobijamo:

$$n_\varphi = n_\psi + n_\theta . \tag{4.6.55}$$

Prema tome, stanje elektrona koji kruži oko jezgra može se opisati sa tri nezavisna kvantna broja:



Slika 4.6.5 Uz pronalaženje veze među različitim kvantnim brojevima.

glavni kvantni broj, *n*:

$$n = n_r + n_\varphi = n_r + n_\psi + n_\theta$$
$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

azimutni kvantni broj, n_φ:

$$n_\varphi = n_\psi + n_\theta,$$
$$n_\varphi = 1, 2, \ldots n$$

magnetni kvantni broj, m:

$$m = n_\varphi \cos\alpha$$
$$m = -n_\varphi, \ldots -1, 0, 1 \ldots n_\varphi .$$

Pomoću njih se izražavaju parametri elektronskih orbita:
velika osa eliptične putanje, *a:*

$$a = \frac{a_0 n^2}{Z} \tag{4.6.56}$$

a_0 – radijus prve Borove orbite H atoma,
mala osa eliptične putanje, b:

$$b = \frac{a_0 n_\varphi}{n} = \frac{n_\varphi n a_0}{Z} \tag{4.6.57}$$

energija elektrona, E_n:

$$E_n = -\frac{Z^2 E_0}{n^2}. \tag{4.6.58}$$

E_0 – energija elektrona u prvoj Borovoj orbiti H atoma i ugao koji zaklapa normala na ravan orbite u odnosu na pravac spoljašnjeg magnetnog polja (kada polje postoji):

$$\cos\alpha = \frac{m}{n_\varphi}. \tag{4.6.59}$$

4.6.5 Kvantni broj n_φ i fina struktura linija vodonikovog spektra

Dopuštajući mogućnost da se elektroni kreću po eliptičnim orbitama, videli smo da je svako njegovo stanje sa glavnim kvantnim brojem, n, n-tostruko degenerisano ($n_\varphi = 1, 2, ...n$). Svakom degenerisanom stanju odgovara jedna vrednost kvantnog broja n_φ, tj. jedna eliptičnost orbite. Iz jednačine (4.6.44) međutim, vidi se da relativistička zavisnost mase elektrona od njegove brzine (tj. eliptičnosti orbite) uklanja degeneraciju. To dovodi do pojave vrlo male razlike između energijskih stanja sa datim n i različitim vrednostima n_φ. Zbog male vrednosti faktora α^2 nivoi su toliko bliski da na normalnom dijagramu nivoa cepanje ne može biti prikazano. Zbog toga se dijagrami konstruišu tako da se za dato n termovi sa različitim n_φ crtaju

jedan pored drugoga na istoj visini, dok se stanja sa istim n_φ i različitim n crtaju jedno iznad drugoga, Slika 4.6.6. Broj podnivoa raste sa porastom kvantnog broja n. Prema Ricovom kombinacionom principu svaki podnivo bi trebalo da se kombinuje sa bilo kojim drugim podnivoom; drugim rečima, njihova energijska razlika bi trebalo da odgovara po jednoj spektralnoj liniji. Saglasno tome, svaka spektralna linija vodonika bi trebalo da se sastoji od velikog broja komponenata.

Korišćenjem instrumenata sa visokim razlaganjem zaista je uočeno da se linije vodonikovog spektra sastoje od više komponenata, samo što je njihov broj znatno, manji od onoga koji se očekuje na osnovu kombinacionog principa. Ovo neslaganje je uslovljeno tzv. **pravilima izbora,** koja iz poluklasične slike, nije moguće izvesti. Pravila izbora detaljnije ćemo razmatrati u okviru kvantnomehaničke slike. Ovde ćemo samo pomenuti osnovno pravilo da se azimutni kvantni broj mora menjati za 1, tj. $\Delta n_\varphi = \pm 1$. To je lako razumeti u sklopu korpuskularne slike fotona, po kojoj foton kao čestica ima sopstveni moment količine kretanja (što je ekvivalentno polarizaciji elektromagnetnog talasa u talasnoj slici). Prema zakonu o održanju ugaonog momenta, koji važi i za atome koji zrače, ugaoni moment posmatranog sistema mora biti konstantan ($L = const.$). To znači da pri emisiji čestice koja poseduje ugaoni moment mora da se menja i ugaoni moment sistema koji je emituje. Pošto je sopstveni moment fotona $\pm 1 \cdot \hbar$ i promena momenta impulsa elektrona čijim prelazom dolazi do emisije zračenja mora biti $\pm 1 \cdot \hbar$ tj. $\Delta n_\varphi = \pm 1$. U vezi sa spektrom vodonikovog atoma to znači da svaka linija Lajmanove serije ($n = 1$) nastaje kombinovanjem samo dve vrste termova ($n = 1, \quad n_\varphi = 1 \to n \geq 2, \quad n_\varphi = 2$). Svaka linija Balmerove serije nastaje kombinovanjem tri vrste termova ($n = 2, \quad n_\varphi = 1 \to n \geq 3, \quad n_\varphi = 2$; $n = 2, \quad n_\varphi = 2 \to n \geq 3, \quad n_\varphi = 1$ i $n = 2, \quad n_\varphi = 2 \to n \geq 3, \quad n_\varphi = 3$), Pašenova pet, itd…

Primeri

Primer 4.6.1 Prirodni sistem jedinica kvantne elektrodinamike obrazuje se tako što se za osnovne jedinice (masu, dužinu, vreme i energiju) uzimaju vrednosti koje odgovaraju nekim elementarnim česticama i fundamentalnim interakcijama. Tako je u ovom sistemu jedinica:

– jedinica mase – masa mirovanja elektrona, $m_0 = 9,1 \times 10^{-31} kg$;

– jedinica energije – energija mase mirovanja elektrona, $m_0 c^2$

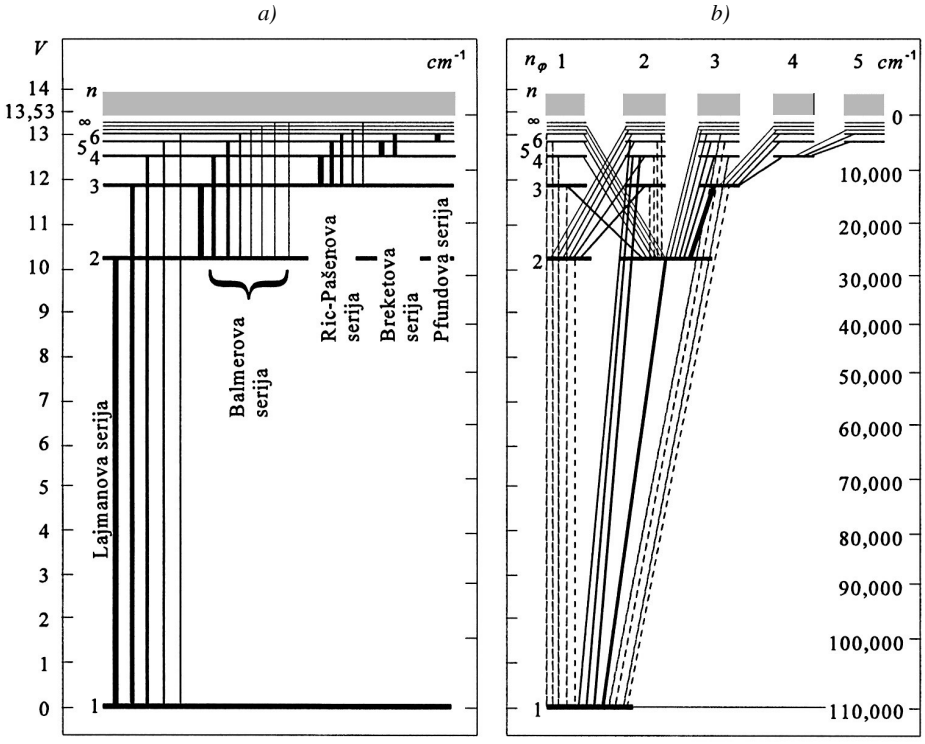
$m_0 c^2 = 0,511 \text{MeV}$;

– jedinica dužine – Komptonova talasna dužina elektrona λ_C podeljena sa 2π, (odeljak 7.3):

$$\frac{\lambda_C}{2\pi} = \frac{\hbar}{m_0 c} = 3,86 \times 10^{-13} m$$

– jedinica za vreme:

$$\frac{\hbar}{m_0 c^2}$$



Slika 4.6.6 Energijski nivoi i spektralne serije atoma vodonika: a) Borov model; b) Bor-Zomerfeldov model. Punim linijama prikazani su dozvoljeni a isprekidanim linijama zabranjeni prelazi za Lajmanovu i Balmerovu seriju. Treba uočiti da su prelazi mogući samo za $\Delta n_\varphi = \pm 1$.

i:

– jedinica naelektrisanja – naelektrisanje elektrona, $e = 1,6 \times 10^{-19} C$.

Ovako definisan sistem jedinica koristan je jer može da pruži jasnu sliku o relativnim dimenzijama atomskih objekata, pojava, interakcija i sl. Na primer, energija elementarne elektrostatičke interakcije može se izraziti kao energija Kulonove interakcije između dva elementarna naelektrisanja koja se nalaze na elementarnom (jediničnom) rastojanju, $\hbar / m_0 c$:

$$(E_{el})_{el} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{\frac{\hbar}{m_0 c}}.$$

Ocenu veličine ove interakcije dobijamo izražavajući je u prirodnim jedinicama za energiju, $m_0 c^2$:

$$\frac{(E_{el})_{el}}{m_0 c^2} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{\frac{\hbar}{m_0 c} m_0 c^2} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c}.$$

Uporedimo li dobijeni izraz sa jednačinom (4.6.44b) kojom je definisana konstanta fine strukture, α, vidimo da je:

$$\alpha = \frac{(E_{el})_{el}}{m_0 c^2} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \qquad \text{(P-4.6.1.1)}$$

iz dobijenog odnosa možemo izvući dva korisna zaključka. Prvo, konstantu fine strukture, α:

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c} = 7,29735308(33)\times 10^{-3}$$

sada možemo shvatiti kao veličinu elektrostatičke interakcije dva jedinična (atomska) naelektrisanja na jediničnom (atomskom) rastojanju izraženu u atomskim jedinicama energije $(m_0 c^2)$, dakle, izraženu u odnosu na energiju mase mirovanja elektrona. Drugo, mala apsolutna vrednost konstante α pokazuje da je elektrostatička interakcija relativno **slaba interakcija.**

Pošto u izraz za α ne ulazi masa elektrona, to znači da se njome izražava uzajamno elektrostatičko delovanje bilo koje dve elementarne čestice sa naelektrisanjem *e*. Stoga je konstanta fine strukture α jedna od pravih **fundamentalnih** konstanti prirode.

Istraživanje osnovnih jednačina preko konstante fine strukture, α, ne samo da ih čini kompaktnijim nego daje i novi način za njihovo tumačenje.

Treba istaći da ovo ipak nije jedinstven i opšteprihvaćen način za definiciju prirodnog sistema jedinica.

Primer 4.6.2 Izraziti Borov atomski radijus preko konstante fine strukture i protumačiti dobijenu formulu.

REŠENJE:

Iz definicije konstante fine strukture (4.6.44b) i (P-4.6.1) nalazimo da je:

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = \alpha\hbar c.$$

Zamenom ovog odnosa u izraz za Borov atomski radijus:

(4.3.11) $$r_n = 4\pi\varepsilon_0\frac{\hbar^2}{Ze^2 m}n^2$$

dobijamo:

$$r_n = \frac{\hbar}{m_0 c}\frac{1}{\alpha}\frac{n^2}{Z} = \frac{\lambda_c}{2\pi\alpha}\frac{n^2}{Z} \qquad \text{(P-4.6.2.1)}$$

gde je λ_C Komptonova talasna dužina elektrona. Za prvu Borovu orbitu atoma vodonika, a_0, gde je $n = 1$ i $Z = 1$ nalazimo:

$$a_0 = \frac{\lambda_C}{2\pi\alpha} \Rightarrow \alpha = \frac{\lambda_C}{2\pi a_0} .$$

Dakle, konstantu fine strukture možemo shvatiti kao odnos Komptonove talasne dužine i Borovog radijusa atoma.

Primer 4.6.3 Izraziti brzinu elektrona u prvoj Borovoj orbiti atoma vodonika preko konstante fine strukture, α.

REŠENJE:

Brzina elektrona u n-toj Borovoj orbiti data je izrazom:

(4.3.10) $$\upsilon_n = \frac{n\hbar}{m_0 r}.$$

Zamenom radijusa iz prethodnog zadatka nalazimo:

$$\upsilon_n = \alpha c \frac{Z}{n} \qquad \text{(P-4.6.3.1)}$$

odakle za prvu Borovu orbitu atoma vodonika ($Z = 1$, $n = 1$) dobijamo:

$$\upsilon_0 = \alpha c \approx \frac{c}{137}. \qquad \text{(P-4.6.3.2)}$$

Dakle, periferna brzina elektrona u prvoj Borovoj orbiti atoma vodonika 137 puta je manja od brzine svetlosti. Zbog toga relativistički efekti imaju mali značaj kod atoma vodonika čime može da se objasni sjajan uspeh Borovog modela.

Iz ovog razmatranja vidimo da konstantu fine strukture, α, možemo definisati i kao odnos brzine elektrona u prvoj Borovoj orbiti i brzine svetlosti.

Primer 4.6.4 Izraziti energiju elektrona u Borovoj orbiti preko konstante fine strukture.

REŠENJE:

Energija elektrona u Borovoj orbiti data je izrazom:

(4.3.13) $$E = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}.$$

Kvadriranjem izraza za konstantu fine strukture (P-4.6.1.1) i preuređivanjem dobijamo:

$$\alpha^2 c^2 = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{e^2}{\hbar^2}$$

što zamenom u jednačinu za energiju daje:

$$E = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\frac{Z^2}{n^2}. \qquad \text{(P-4.6.4.1)}$$

Za prvu Borovu orbitu atoma vodonika, $Z = 1$, $n = 1$, nalazimo:

$$E = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2.$$

Vidimo da je energija elektrona u prvoj Borovoj orbiti atoma vodonika zanemarljivo mala u odnosu na energiju mase mirovanja elektrona. Iz toga, kao i ranije zaključujemo da kod atoma vodonika relativistički efekti mogu da se zanemare bez većih nevolja u vezi sa kvantitativnim tumačenjem rezultata.

Primer 4.6.5 Izraziti Ridbergovu konstantu u prirodnom sistemu jedinica:

$$R_H = \frac{1}{4\pi}\frac{\alpha}{r_0} = \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{\lambda_C}.$$

4.7 SPEKTRI ATOMA ALKALNIH METALA

Jedna od veoma važnih odlika Bor-Zomerfeldove teorije jeste da pruža mogućnost za kvalitativno razumevanje porekla i nastanka različitih serija u spektrima atoma alkalnih metala, koristeći analogiju sa atomom vodonika i njegovim spektrima.

U prvim posmatranjima spektara litijuma, natrijuma ili bilo koga drugog alkalnog metala bilo je teško uočiti zakonomernost u položaju spektralnih linija. Međutim, 1890. su Pašen, Kajzer i Runge, a u isto vreme i Ridberg, otkrili da linije mogu da se razvrstaju u nekoliko serija koje se delimično prekrivaju. Serija sa najsjajnijim linijama nazvana je glavnom (engl. principal), sa najbolje definisanim linijama oštrom (engl. sharp), a sa slabije definisanim linijama difuznom (engl. diffuse). Četvrta serija je pogrešno nazvana fundamentalnom (engl. fundamental) jer se kasnije pokazalo da ništa nije fundamentalnija od bilo koje druge serije. Prema kombinacionom principu, serije se mogu prikazati kao linearne kombinacije odgovarajućih spektralnih termova.

Glavna (principal) serija:

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(1+s)^2} - \frac{R}{(k+p)^2} \qquad (4.7.1)$$

$$k = 2, 3, 4, \ldots.$$

II sporedna, oštra (sharp):

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(2+p)^2} - \frac{R}{(k+s)^2} \qquad (4.7.2)$$

$$k = 2, 3, 4, \ldots.$$

I sporedna, difuzna (diffuse):

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(2+p)^2} - \frac{R}{(k+d)^2} \tag{4.7.3}$$

$k = 3, 4, 5, ...$

Bergmanova, fundamentalna (fundamental):

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(3+d)^2} - \frac{R}{(k+f)^2} \tag{4.7.4}$$

$k = 4, 5, 6, ...$

Ovde su *s, p, d* i *f* konstante koje su karakteristične za različite alkalne atome, a *R* je Ridbergova konstanta. Vrednost *s* kreće se od 0,4 za Na do 0,87 za Cs; *p* se menja od nule do 0,3 dok su vrednosti *d* i *f* vrlo male i primetno se razlikuju od nule samo za najteže alkalne atome.

Ako uporedimo ove (empirijske) jednačine sa Ridbergovom formulom za spektralne serije vodonikovog atoma (4.2.4):

Lajmanova:

$$\tilde{\nu} = R_H\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{k^2}\right) = \frac{R}{1^2} - \frac{R}{k^2} \tag{4.7.5}$$

Balmerova:

$$\tilde{\nu} = R_H\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{k^2}\right) = \frac{R}{2^2} - \frac{R}{k^2} \tag{4.7.6}$$

Pašenova:

$$\tilde{\nu} = R_H\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{k^2}\right) = \frac{R}{3^2} - \frac{R}{k^2} \tag{4.7.7}$$

Breketova:

$$\tilde{\nu} = R_H\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{k^2}\right) = \frac{R}{4^2} - \frac{R}{k^2} \tag{4.7.8}$$

Pfundova:

$$\tilde{\nu} = R_H\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{k^2}\right) = \frac{R}{5^2} - \frac{R}{k^2} \tag{4.7.9}$$

vidimo da su one istog oblika, s tim što su kod vodonika konstante *s, p, d* i *f* jednake nuli. Ovim karakterističnim konstantama (*s, p, d* i *f*) uzima se u obzir poremećaj orbite optičkog elektrona nastao prisustvom drugih elektrona u nižim elektronskim orbitama koji za to vreme ne emituju zračenje.

4.7.1 Efektivno naelektrisanje i konstanta zaklanjanja

Poznato je da atomi alkalnih metala imaju jedan (optički) elektron, te da se po hemijskim osobinama mogu svrstati ispod vodonika u periodnom sistemu. Stoga se, u prvoj aproksimaciji, kretanje ovog elektrona može opisati analogno kretanju elektrona u vodonikovom atomu, s tom razlikom što se ovaj elektron kreće u efektivnom polju koje je superpozicija polja jezgra i ostalih elektrona, Slika 4.7.1. Tada je, po analogiji sa energijom elektrona u atomu vodonikovog tipa gde je:

(4.4.3a)
$$E = -\frac{hcRZ^2}{n^2} \tag{4.7.10}$$

energija elektrona kod alkalnih metala data izrazom:

$$E = -\frac{hcRZ_{eff}^2}{n^2}. \tag{4.7.11}$$

Z_{eff} je efektivno naelektrisanje:

$$Z_{eff} = Z - \sigma_{n,n_\varphi} \tag{4.7.12}$$

a σ_{n,n_φ} konstanta zaklanjanja. U idealnom slučaju kada ne bi bilo interakcije optičkog elektrona sa ostalim elektronima, tj. kada bi se ostali elektroni kretali samo u maloj zapremini u okolini jezgra, efektivno naelektrisanje bi bilo jednako jediničnom, tj.:

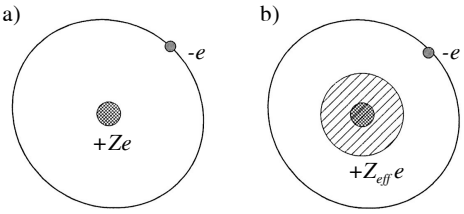
$$\sigma_{n,n_\varphi} = Z - 1. \tag{4.7.13}$$

Međutim, zbog prodiranja optičkog elektrona u unutrašnjost elektronskog oblaka, Slika 4.7.2, imamo da je:

$$\sigma_{n,n_\varphi} < Z-1 \tag{4.7.14}$$

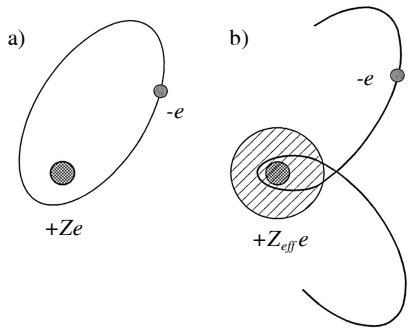
tj. efektivno nalektrisanje je veće od 1.

Kako smo već videli, svakom energijskom nivou u vodonikovom atomu odgovara više eliptičnih putanja različitog ekscentriciteta. Međutim, za razliku od vodonika, kod alkalnih metala ovi nivoi nisu degenerisani čak i kada zanemarimo relativističku promenu mase elektrona. Orbite sa najvećim ekscentricitetom najviše se približavaju jezgru zbog čega na njih električno polje jezgra deluje mnogo jače jer naelektrisanje jezgra nije kompenzovano naelektrisanjem ostalih (unutrašnjih) elektrona. Drugim rečima, ove orbite imaju najveće efektivno naelektrisanje, što sa-



Slika 4.7.1 Optički elektron u polju jezgra: a) kod vodonikovog atoma na elektron deluje polje jezgra direktno; b) kod alkalnih metala jezgro je zaklonjeno elektronima iz donjih orbita pa na elektron deluje efektivno polje koje je superpozicija polja jezgra i ostalih elektrona.

glasno jednačini (4.7.11) dovodi do snižavanja njihovih energijskih nivoa. Znači, kod eliptičnih putanja energija spoljašnjeg elektrona je niža od energije elektrona u kružnoj putanji. Kod atoma vodonika, zanemarimo li mali relativistički efekt, ove dve energije su jednake.



Slika 4.7.2 Uklanjanje degeneracije energijskih nivoa kod eliptičkih putanja: a) kod vodonikovog atoma degeneracija se uklanja zbog relativističke promene mase; b) kod alkalnih metala daleko veći značaj ima promena efektivnog naelektrisanja zbog prodiranja putanje optičkog elektrona u unutrašnjost donje elektronske ljuske.

Odstupanje energijskih nivoa elektrona kod alkalnih metala od nivoa u atomu vodonika zavisi od izduženosti elipse, tj. od kvantnog broja n_φ koji određuje ugaoni moment. Ovde treba uočiti bitnu razliku između zavisnosti energije elektrona od n_φ kod vodonika i kod alkalnih metala. Kod vodonika zavisnost je veoma slaba i posledica je relativističke promene mase elektrona koja je najizrazitija kod orbita sa najvećim ekscentricitetom. U spektrima vodonikovog atoma ova zavisnost dovodi do pojave fine strukture spektralnih linija. Kod alkalnih metala, zavisnost energije elektrona od ekscentriciteta orbite (pored relativističke promene mase) **posledica je promene efektivnog električnog polja** prouzrokovane prodiranjem putanje optičkog elektrona u unutrašnjost orbita elektrona u nižim energijskim stanjima, Slika 4.7.2.

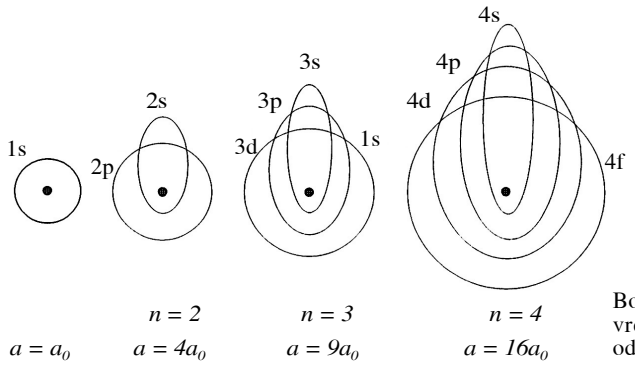
Pošto efektivno naelektrisanje zavisi od kvantnih brojeva n i n_φ razmotrićemo sistematski uticaj različitih vrednosti n_φ na energijsko stanje elektrona, Slika 4.7.3.

***s* orbita, $n_\varphi = 1$**. Ove elipse su najizduženije pa je za njih odstupanje energije od izraza (4.7.10) najveće. Elipsa za $n_\varphi = 1$ prve spoljašnje ljuske predstavlja stabilno stanje spoljašnjeg elektrona alkalnih metala, jer ima najnižu energiju. Krećući se po toj elipsi elektron velikim delom svoje orbite ulazi u prostor unutrašnjih ljuski. Ove orbite nazivaju se *s*-orbite a njihovi spektralni termovi označavaju se slovom *s*. Svakoj spoljašnjoj ljusci, različitog glavnog kvantnog broja *n,* odgovara jedna *s* orbita i spektralni term, *nS*.

***p* orbita, $n_\varphi = 2$**. U litijumovom atomu u osnovnom stanju spoljašnji elektron se kreće u drugoj ljusci pa $n_\varphi = n = 2$ odgovara kružnoj orbiti. Zbog toga je energija ovoga stanja vrlo bliska energiji elektrona u odgovarajućem stanju kod atoma vodonika. Kod natrijuma, međutim, $n_\varphi = 2$, $n = 3$ odgovara elipsi. Zbog toga su kod alkalnih metoda, počevši od natrijuma, energije elektrona sa ovim azimutalnim kvantnim brojem niže od energije elektrona kod vodonika u istom kvantnom stanju. Orbite sa $n_\varphi = 2$ označavaju se slovom *p* a njihovi termovi *P,* odnosno *nP* gde je *n* glavni kvantni broj.

***d* orbita, $n_\varphi = 3$**. Za treću ljusku ($n = 3$) ovim kvantnim brojem definiše se kružna orbita. Kod četvrte ljuske odgovarajuća orbita je eliptična, međutim, sa vrlo malim ekscentricitetom. Stoga je energija ove orbite bliska energiji odgovarajuće orbite vodonikovog atoma. Orbite se označavaju slovom *d* a spektralni termovi *nD.*

***f* orbita, $n_\varphi = 4$**. Energije ovih orbita vrlo su slične onima za vodonikov atom pošto se javljaju tek u četvrtoj ljusci kada je radijus $16a_0$, Slika 4.7.3. Za $n > 4$ eliptične putanje imaju vrlo mali ekscentricitet i neznatno odstupanje od kružnih. Oznaka orbita je *f* a termova *nF.*



Slika 4.7.3 Orbite elektrona po Bor-Zomerfeldovom modelu za vrednosti glavnog kvantnog broja od 1 do 4.

Prema tome, sistem spektralnih termova alkalnih metala može se predstaviti sumarno sledećim simbolima:

orbita	n_φ	spektralni term
s	1	*nS*
p	2	*nP*
d	3	*nD*
f	4	*nF.*

4.7.2 Efektivni kvantni broj i kvantni defekt

Drugi način da se posmatra energija elektrona kod alkalnih metala je da se efektivno naelektrisanje smatra jediničnim, $Z_{eff} = 1$ a da se umesto glavnog kvantnog broja, *n,* koristi efektivni kvantni broj n^*. Tada se izraz za energiju elektrona (4.7.10) može pisati na sledeći način:

$$E = -\frac{hcR}{n^{*2}}. \tag{4.7.15}$$

Ovde se odstupanje energije elektrona od energije u atomu vodonika umesto preko efektivnog naelektrisanja izražava efektivnim kvantnim brojem, $n^* = n - \Delta$; Δ je kvantni defekt. I kvantni defekt zavisi od n i n_φ, pa je energija elektrona u stanju sa glavnim kvantnim brojem n i azimutalnim kvantnim brojem n_φ:

$$\begin{aligned} E_{n,s} &= -\frac{hcR}{(n-\Delta_s)^2} \\ E_{n,p} &= -\frac{hcR}{(n-\Delta_p)^2} \\ E_{n,d} &= -\frac{hcR}{(n-\Delta_d)^2}. \end{aligned} \tag{4.7.16}$$

Najzad, da bi se izrazi (4.7.16) povezali sa termovima spektralnih serija, datih jednačinama (4.7.1) – (4.7.4), potrebno je osloboditi se zavisnosti energije elektrona od glavnog kvantnog broja. To se postiže jednostavnom transformacijom:

$$\begin{aligned} n - \Delta_s &= k + s \\ n - \Delta_p &= k + p \\ n - \Delta_d &= k + d \end{aligned} \tag{4.7.17}$$

gde se zavisnost energije od glavnog kvantnog broja prenosi na celobrojni parametar k i numeričke konstante s, p i d:

$$\begin{aligned} E_{k,s} &= -\frac{hcR}{(k+s)^2} \\ E_{k,p} &= -\frac{hcR}{(k+p)^2} \\ E_{k,d} &= -\frac{hcR}{(k+d)^2}. \end{aligned} \tag{4.7.18}$$

Iz ovih izraza za energiju elektrona lako je dobiti odgovarajuće spektralne termove:

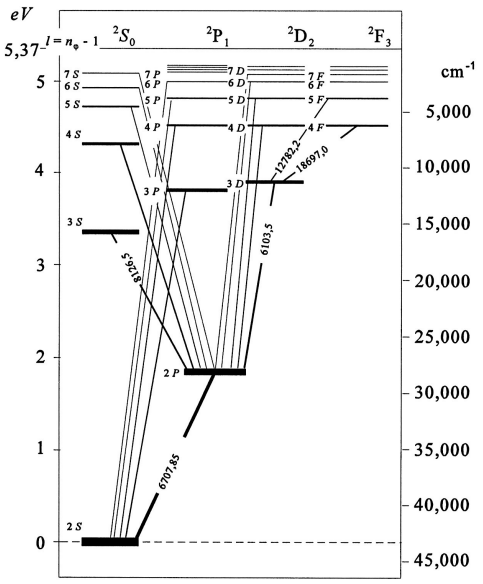
$$\begin{aligned} kS &= \frac{E_{k,s}}{hc} = -\frac{R}{(k+s)^2} \\ kP &= \frac{E_{k,p}}{hc} = -\frac{R}{(k+p)^2} \\ kD &= \frac{E_{k,d}}{hc} = -\frac{R}{(k+d)^2}. \end{aligned} \tag{4.7.19}$$

Prema izbornom pravilu, kvantni broj n_φ menja se za jedinicu, $\Delta n_\varphi = \pm 1$, pa su mogući prelazi $S \to P, P \to D, P \to S, D \to F$ .... Najlakše se opažaju prelazi sa osnovnih, nepobuđenih stanja pošto su pri normalnim laboratorijskim uslovima ova stanja najverovatnija. Tada se spektralne serije (4.7.1) – (4.7.4) mogu predstaviti kao kombinacija odgovarajućih spektralnih termova:

glavna serija	$\tilde{\nu} = 1S - kP \quad k = 2, 3, \ldots$	
II sporedna	$\tilde{\nu} = 2P - kS \quad k = 2, 3, \ldots$	(4.7.20)
I sporedna	$\tilde{\nu} = 2P - kD \quad k = 3, 4, \ldots$	
fundamentalna	$\tilde{\nu} = 3D - kF \quad k = 4, 5, \ldots$	

ovde treba uočiti da numeričke konstante 1, 2, 2 i 3 ne predstavljaju vrednost glavnog kvantnog broja n nego parametra k kojim se karakteriše dati spektralni term. A nekad u istim termovima figuriše glavni kvantni broj.... Zbrka sa ovim simbolima nastala je davno i održala se do današnjih dana zbog toga što se prelazi sa osnovnih nivoa alkalnih metala (2*s* za litijum, 3*s* za natrijum, ... 6*s* za cezijum) predstavljaju zajedničkom vrednošću $k = 1$. Međutim, u praksi nije teško dokučiti o kojem parametru (k ili n) je reč.

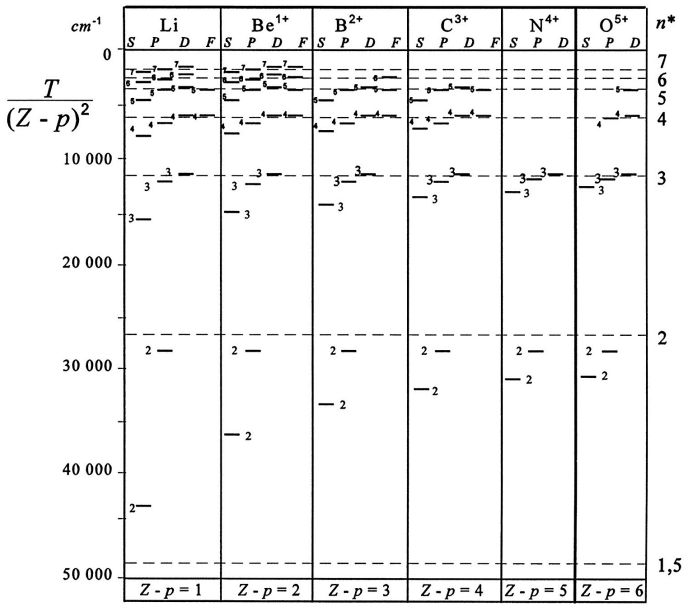
Dijagram energijskih stanja atoma litijuma prikazan je na Slici 4.7.4. On je u opštim crtama sličan dijagramu za vodonikov atom. Zbog pravila izbora, $\Delta n_\varphi = \pm 1$ mogući su samo prelazi između susednih nizova termova.



Slika 4.7.4 Dijagram energijskih nivoa litijumovog atoma.

Na Slici 4.7.5 prikazan je sistem termova atoma litijuma i litijumu sličnih jona, Be^{+}, B^{++}, C^{3+}, N^{4+} i O^{5+}. Na desnoj strani sa n^* označen je glavni kvantni broj a isprekidanom linijom položaj terma za atom vodonika. Termovi su korigovani za

različito naelektrisanje jezgra faktorom $1/(Z - p)^2$, gde je p broj elektrona u donjim elektronskim ljuskama. Za prikazane elemente $p = 2$ pa $Z - p$ ima vrednosti 1, 2, 3,… Prema tome, ako su alkalnim metalima slični spektri istovremeno i vodoniku slični onda deljenjem svih termova sa $(Z - p)^2$ treba da dobijemo iste vrednosti za iznose njihovih energija. To se zaista dobija samo za D i F termove čije su energije veoma bliske energijama odgovarajućih termova vodonikovog atoma. Kod drugih termova dolazi do odstupanja koje je najveće za S termove, kako je ranije već opisano.



Slika 4.7.5 Dijagram energijskih stanja litijuma i litijumu sličnih jona do kiseonika.

Treba uočiti da sa porastom naelektrisanja jezgra, Z, odstupanje energije od vodonikovih termova postaje sve manje. Ovo se objašnjava činjenicom da se sa porastom Z radijus orbita unutrašnjih elektrona smanjuje tako da efektivno električno polje koje deluje na spoljašnji elektron postaje sve bliže pravom Kulonovom polju. Prema tome, Bor-Zomerfeldova teorija u stanju je tačno da opiše spektre atoma vodonika, da predvidi postojanje njihove fine strukture kao i da kvalitativno opiše spektre alkalnih metala. Međutim, vrlo rano je otkriveno da se spektralne linije alkalnih metala sastoje od dve komponente čije poreklo nije moguće opisati kvantnim brojevima n i n_φ. Otuda je bilo jasno da elektron u atomu poseduje neki novi stepen slobode koji u teorijskim razmatranjima još nije uziman u obzir.

4.8 FINA STRUKTURA SPEKTARA ALKALNIH METALA I SPIN ELEKTRONA

Dva niza kvantnih brojeva, n i n_φ Bor-Zomerfeldove teorije mogu da opišu opšte osobine spektara alkalnih metala ali ne i finu strukturu njihovih linija koja je za najveći broj linija vrlo očigledna. Spektralne linije alkalnih metala su sastavljene od parova linija, dubleta. Katkad su dubleti praćeni i trećom, znatno

slabijom, satelitskom linijom. Na primer, poznata žuta linija natrijuma predstavlja dublet sa komponentama na 589,0 i 589,6 nm. Ovde je razlika među komponentama dubleta 0,6 nm. Za lakše atome razlika je manja; za litijum je toliko mala da se može videti samo instrumentima koji poseduju izvanredno veliku moć razlaganja. Kod cezijuma komponente dubleta razmaknute su 40 nm.

Da bi se opisala dubletna struktura tih linija bilo je potrebno pretpostaviti da su *P, D* i *F* energijski nivoi (termovi) dubletni nivoi (tj. da svaki nivo sadrži dve komponente) a da su *S* nivoi (termovi) singuletni. Ove osobine spektralnih termova moguće je objasniti uvođenjem novog stepena slobode za elektron i to takvog u kome će elektron imati jednu od dve moguće vrednosti. Novom stepenu slobode pridružen je i novi kvantni broj.

Priroda novog kvantnog broja kao i njegov fizički smisao nisu bili jasni sve dok Goudsmit i Ulenbek (Goudsmit, Uhlenbeck) 1925. godine nisu pretpostavili da se on može pripisati rotaciji elektrona oko sopstvene ose. Ovom pretpostavkom kompletiran je planetarni model atoma, u kome se pored rotacije elektrona oko jezgra (planeta oko Sunca) uzima u obzir i rotacija elektrona oko sopstvene ose (rotacija planeta oko sopstvene ose). Sopstveni ugaoni moment (spin) i njemu pridruženi magnetni moment nezavisni su od orbitnog kretanja elektrona i mogu se smatrati unutrašnjom konstantom elektrona poput njegove mase i naelektrisanja.

Veličina spinskog momenta u jedinicama $\hbar$ nominalno je data sa $s\hbar$ gde je s spinski kvantni broj. U atomskom, ili u spoljašnjem magnetnom polju postoje dve moguće orijentacije elektrona koje se predstavljaju magnetnim spinskim kvantnim brojem m_s. Kao i kod orbitnog magnetnog kvantnog broja m_l koji ima vrednosti od $-n_\varphi$ do $+n_\varphi$ sa jediničnim inkrementom, m_s može imati vrednosti od $-s$ do $+s$ uz $\Delta m_s = 1$. S obzirom na to da su moguća samo dva stanja, ona moraju biti $+s$ i $-s$. Razlika među njima mora biti jedinica $[s - (-s) = 1]$ pa imamo $2s = 1$, tj.:

$$s = \frac{1}{2} \quad \text{i} \quad m_s = \pm\frac{1}{2}. \tag{4.8.1}$$

Pošto energija stanja zavisi od ukupnog momenta impulsa, zbira orbitnog i spinskog momenta, može se definisati novi kvantni broj, **unutrašnji kvantni broj** koji je jednak algebarskom zbiru orbitnog i spinskog kvantnog broja. Označimo li ukupni moment količine kretanja sa $\vec{j}$, orbitni ugaoni moment sa $\vec{l}$ i spinski moment sa $\vec{s}$ dobijamo:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}\,. \tag{4.8.2}$$

Za spinski moment smo već rekli da je $\hbar/2$ (kasnije ćemo videti da to nije sasvim tačno) i da je uvek praćen i magnetnim spinskim momentom.

Orbitni ugaoni moment izražavamo kao celobrojni umnožak od $\hbar$:

$$|\vec{l}| = l\hbar \qquad l = 0, 1, 2, \ldots, n - 1 \tag{4.8.3}$$

koji je ekvivalentan Bor-Zomerfeldovom momentu ($L = n_\varphi\hbar$, $n_\varphi = 1, 2, \ldots n$.) i jednak njemu kada je:

$$l = n_\varphi - 1. \tag{4.8.4}$$

Ova razlika među momentima, iako mala, ima izvanredno veliki značaj. Naime, klasično shvatanje orbitnog kretanja ne dopušta $n_\varphi = 0$ jer bi tada elektron prolazio kroz jezgro. Međutim, u kvantnoj teoriji činjenica da elektron može da se nađe u položaju jezgra ne samo da nije protivrečna fizičkoj slici nego je vrlo korisna za opisivanje nekih pojava. Ovde je dovoljno samo da kažemo da u kvantnoj slici putanja elektrona ne postoji ni kao koncept, pa stoga nije teško zamisliti stanje elektrona sa nultim orbitnim momentom. U ovom slučaju kada pokušavamo da objasnimo dubletnu strukturu spektralnih linija alkalnih metala, suočeni smo s činjenicom da su *S* termovi singuletni. Pošto je njihova energija određena kombinacijom orbitnog i spinskog momenta, direktno sledi da orbitni moment *S* termova mora biti jednak nuli. U tom slučaju, spinska stanja su degenerisana i postoji samo jedan energijski nivo, saglasno eksperimentalnim opažanjima. Sama činjenica da moramo da napustimo kvantni broj n_φ ukazuje na granicu valjanosti Bor-Zomerfeldove teorije a s njom i intuitivne slike o strukturi atoma. Slika je sve manje očigledna i sve više formalizovana. To jasno ukazuje na potrebu za potpuno novim konceptualnim tumačenjem strukture atoma, o čemu će više reči biti kasnije u vezi sa Šredingerovom jednačinom.

S obzirom na izraz (4.8.3), vrednosti orbitnog kvantnog broja, *l,* za termove *S, P, D* i *F* su 0, 1, 2 i 3 respektivno. Kombinovanjem kvantnih brojeva *l* i *s* dobijaju se sledeće vrednosti unutrašnjeg kvantnog broja, *j*:

$$\begin{aligned} j &= l \pm \frac{1}{2} \qquad \text{za} \quad l > 0 \\ j &= \frac{1}{2} \qquad \text{za} \quad l = 0. \end{aligned} \tag{4.8.5}$$

Za *S* termove $j = 1/2$ Za *P* termove $j = l \pm 1/2 = 1/2$ ili 3/2, za *D* termove $j = 3/2$ ili 5/2 i za *F* termove $j = 5/2$ ili 7/2. Prema tome, *P, D* i *F* nivoi pod uticajem elektronskog spina postaju dubletni.

Pravilo izbora za kvantni broj *l* isto je kao i za n_φ:

$$\Delta l = \pm 1 \qquad \Delta l \neq 0$$

dok za *j* važi:

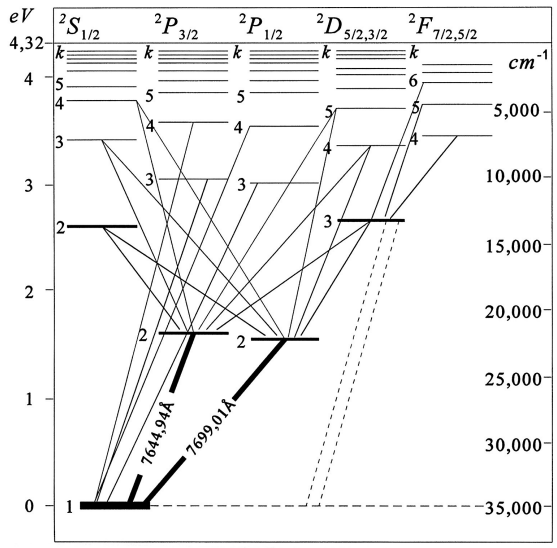
$$\Delta j = \pm 1, 0. \tag{4.8.6}$$

Pošto je dubletno cepanje nivoa relativno malo na dijagramu energijskih stanja termovi sa različitim *j* vrednostima nanose se jedan pored drugog, kao što je pokazano na Slici 4.8.1 za termove kalijuma. Pri tome su njihove oznake sledeće:

$$^{\text{multipletnost}}(\text{orbitni kv. broj, } l)_{\text{unutrašnji kv. broj, } j}$$

ili:

$$^{2s+1}l_j$$



Slika 4.8.1 Dijagram energijskih nivoa atoma kalijuma; *k* je empirijski, redni broj terma kao u izrazima (4.7.1)–(4.7.4) i (4.7.18)–(4.7.20).

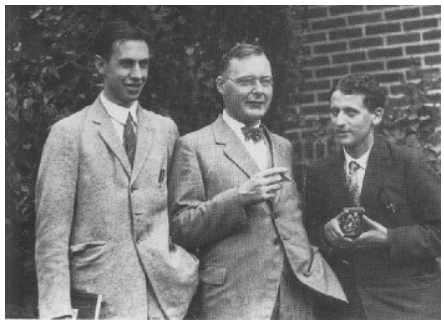
gde multipletnost označava broj načina na koji mogu da se realizuju različita elektronska spinska stanja, $2S + 1$, gde je S rezultujući spinski broj. Za višeelektronske atome S predstavlja algebarski zbir spinova pojedinih elektrona, $S = \sum s$. Za alkalne metale, pošto imaju jedan optički elektron, $S = s = 1/2$ pa je multipletnost svih termova 2. (Treba uočiti da se slovima s i S pored toga označavaju i orbite i njima pridruženi spektralni termovi za $l = 0$. Ne mešati jedne s drugima!). Vrednost orbitnog kvantnog broja, izražava se odgovarajućim slovom, kako je već pomenuto. Najzad, kvantni broj j se izračunava pomoću izraza (4.8.5). Na primer, spektralni term natrijuma sa orbitnim kvantnim brojem $l = 1$, i unutrašnjim kvantnim brojem $j = 3/2$ označava se $^2P_{3/2}$. Pošto imaju samo po jedan optički elektron svi spektralni termovi atoma alkalnih metala su dubletni, $2s + 1 = 2(1/2) + 1 = 2$.

Prema tome, za opisivanje spektara alkalnih metala potrebno je uzeti u obzir tri stepena slobode elektrona, koji se predstavljaju sa kvantnim brojevima *n, l* i *s* (ili *n, l* i *j*). Međutim, kao što će se videti u sledećem odeljku, ako se posmatra spektar atoma koji se nalazi u magnetnom polju, potrebno je uzeti u obzir i četvrti stepen slobode koji se izražava magnetnim kvantnim brojem, m_l. Četiri kvantna broja su dovoljna za potpuno opisivanje stanja elektrona u atomu.

Fridrih Pašen (Friedrich Paschen, 1865–1947), rodio se u Šverinu (Nemačka) i bio profesor u Tibingenu i Bonu. Godine 1908. proširio je Balmerovu formulu na infracrveni deo spektra vodonikovog atoma (Pašenova serija). Zajedno sa Bakom (Back) 1912/13. otkrio je Pašen-Bakov efekt, cepanje linija u jakom magnetnom polju.

Semjuel Abraham Gudsmit (Samuel Abraham Goudsmit, 1902–1978), predavao je na Mičigen univerzitetu u An Arboru (1928–1941) i na MIT-u (Masačusetski tehnološki institut) u Kembridžu (Masačusets, SAD). Od 1948. radio je u Brukhavenskoj nacionalnoj laboratoriji (Apton, država Njujork, SAD), uglavnom baveći se strukturom atomskih spektara. Da bi objasnio multipletnost spektralnih linija Gudsmit je zajedno sa Ulenbekom 1925. godine uveo spin elektrona u kvantnu teoriju.

Džordž Judžin Ulenbek (Georg Eugen Uhlenbeck, 1900–1988), je bio profesor Univerziteta u Urtehtu i An Arboru (Mičigen, SAD). Godine 1925. zajedno sa S. A. Goudšmitom uveo je hipotezu o unutrašnjoj rotaciji elektrona – spin elektrona.



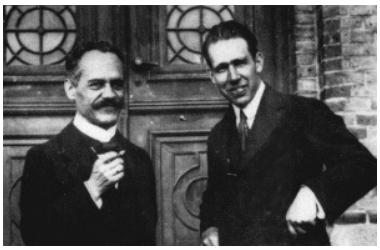
Ulenbek, Kramer i Gudsmit

Jan Robert Ridberg (Janne Robert Rydberg, 1854–1919), rodio se u Halštadu (Švedska). Od 1901. bio je profesor u Lundu i radio na periodnom sistemu elemenata i spektralnim serijama. Po njemu su nazive dobili Ridbergova konstanta, i, u novije vreme, Ridbergovi atomi.

Johan Jakob Balmer (Johann Jakob Balmer, 1858–1898), švajcarski matematičar. Predavao je na Bazelskom koledžu za gospođice a od 1865. do 1890. takođe i na Univerzitetu u Bazelu. Godine 1885. postavio je formulu kojom je opisan tada poznati deo serije vodonikovog atoma (Balmerova serija). Kasnije je uočio vezu između njegove konstante k i Ridbergove konstante, kao i njenu ulogu granice serije.

Teodor Lajman (Theodore Lyman, 1874–1954), rodio se u Bostonu, i od 1910. do 1947. bio direktor Džeferson fizičke laboratorije na Harvardu. Bio je pionir u polju UV spektroskopije. Godine 1906. otkrio je seriju linija vodonikovog atoma u UV oblasti, koja je po njemu i dobila ime.

Nils Bor (Niels Bohr, 1885–1962), rodio se u Kopenhagenu i doktorirao na tamošnjem univerzitetu 1911. godine. Radio je u Kevendiškoj laboratoriji kod Dž. Dž. Tomsona i na Mančesterskom univerzitetu kod E. Raderforda. Godine 1913. uspešno je primenio Plankovu hipotezu na Raderfordov planetarni model atoma, a 1920. osnovao je u Kopenhagenu Institut za teorijsku fiziku. Nobelovu nagradu za fiziku dobio je 1922. godine za ispitivanje strukture atoma i zračenja koje iz njih izvire.



Zomerfeld (levo) i Bor (desno)

Arnold Johan Vilhelm Zomerfeld (Arnold Johann Wilhelm Sommerfeld, 1868–1951), rodio se u Kenigsbergu (Nemačka) današnjem Kalinjingradu (Ruska Federacija), gde je završio studije. Od 1906. do 1940. bio je profesor Minhenskog univerziteta. Autor je oko 300 naučnih radova i desetak knjiga. Bavio se kvantnom teorijom atoma, spektroskopijom i matematičkom fizikom. Pored drugih priznanja, dobitnik je Plankove medalje (1931), Lorencove medalje (1939) i Erstedove medalje (1948).

Gustav Hertz (Gustav Hertz, 1887–1975), sinovac Hajnriha Herca, pronalazača radio-talasa, rodio se u Hamburgu, bio profesor u Haleu i Berlinu a kasnije načelnik istraživačke laboratorije u fabrici „Simens". Godine 1911. započeo je istraživanja (zajedno sa Frankom) pobuđivanja atoma u sudaru sa elektronima, za koja su njih dvojica dobili Nobelovu nagradu za fiziku 1925. godine. Od 1945. radio je na različitim projektima u Sovjetskom Savezu.

Džejms Frank (James Franck, 1882–1964), rodio se u Hamburgu. Radio je u Institutu za fizičku hemiju Kajzer Vilhelm a 1920. postaje i profesor u Getingenu. Godine 1933. emigrira iz Nemačke i 1935. postaje profesor fizike na Univerzitetu Džon Hopkins u Baltimoru. Od 1938. do 1947. profesor je fizičke hemije u Čikagu. Zajedno sa G. Hercom u Fizičkom institutu u Berlinu ispitivao je prenos energije u sudarima elektrona sa gasnim atomima. Ti su rezultati podržali Plankovu kvantnu hipotezu i Borovu teoriju o nastanku spektralnih linija. Godine 1925. Frank i Herc su podelili Nobelovu nagradu za fiziku za pronalazak zakonitosti pri sudaru elektrona i atoma.

5. ATOM – ORBITNI I SPINSKI MAGNETIZAM

Poznato je iz elektromagnetike da je magnetna indukcija (magnetno polje) u slobodnom prostoru prouzrokovana kretanjem naelektrisanja odnosno tokom električne struje. Na isti način, magnetna indukcija u materiji (magnetizam materije) pripisuje se postojanju mikrostruja u njoj. Ove struje nazivaju se Amperovim strujama zato što ideja o njihovom postojanju potiče još od Ampera, dakle, mnogo pre otkrića elektrona. Amperova hipoteza nailazila je na teškoće jer njome nije moglo da se objasni postojano održavanje ovih struja bez utroška energije. Međutim, kao što je već delom pokazano u prethodnim poglavljima, pojam mikrostruja ne samo da ne protivreči savremenom shvatanju strukture materije nego se njegovom neposrednom primenom kvantitativno objašnjava veliki broj pojava vezanih za magnetizam materije.

Glavni problem u vezi sa magnetnim osobinama materije jeste pitanje porekla elementarnog magnetizma. U ovom poglavlju opisaćemo pojave orbitnog i spinskog magnetizma, njihovo međusobno dejstvo kao i njihove interakcije sa spoljašnjim magnetnim poljem.

5.1 MAGNETNI MOMENT ATOMA VODONIKA

DODATAK 5.1

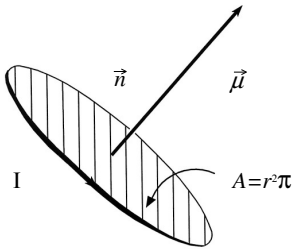
D-5.1.1 Magnetni moment strujne konture

Magnetni moment strujne konture $\vec{\mu}_p$. Slika D-5.1.1, proporcionalan je veličini površine A koju opisuje kontura i jačini struje I koja kroz nju prolazi:

$$\vec{\mu}_p = IA\vec{n}. \qquad \text{(D-5.1.1a)}$$

Jedinični vektor $\vec{n}$ normalan na ravan konture određuje pravac delovanja magnetnog momenta. Smer magnetnog momenta sledi pravilo desne ruke u odnosu na tok električne struje. Za kružnu konturu poluprečnika r površina je $r^2\pi$, pa je:

$$\vec{\mu}_p = r^2 \pi I \vec{n}. \qquad \text{(D-5.1.1b)}$$



Slika D-5.1.1 Magnetni moment strujne konture upravljen je normalno na ravan konture, a smer mu se određuje po pravilu desne ruke u odnosu na tok električne struje.

5.1.1 Orbitni magnetni moment

Poznato je (odeljak D-5.1.1) da makroskopska strujna kontura ima magnetni moment, tj., da ima osobine magnetnog dipola. Slično tome, očekivalo bi se da elektron, kružeći po Borovoj orbiti, izazove pojavu orbitnog magnetnog momenta. Elektronska (Borova) orbita, zapravo, predstavlja mikroskopsku strujnu konturu kroz koju protiče Amperova struja. Magnetni moment orbite može da se izrazi istom jednačinom kao i magnetni moment makroskopske strujne konture:

(D-5.1.1a) $$\vec{\mu}_p = I\vec{A} \qquad (Am^2). \qquad (5.1.1)$$

Ovde je I struja koju stvara elektron kružeći po orbiti (Amperova struja), a $\vec{A}$ vektor koji je normalan na ravan orbite i čiji je intenzitet jednak veličini površine koju orbita opisuje, a smer mu određuje tok električne struje po pravilu desne ruke. Indeks p označava da magnetni moment vodi poreklo od orbitnog kretanja elektrona. S obzirom na to da je vektor magnetnog momenta $\vec{\mu}_p$ paralelan vektoru $\vec{A}$, znači da je i magnetni moment normalan na ravan orbite.

Jačina električne struje, kao količina naelektrisanja koja prođe kroz presek provodnika u jedinici vremena, za elektronsku orbitu u kojoj naelektrisanje $-e$ opiše jedan krug u vremenu T, data je izrazom:

$$I = \frac{dq}{dt} = \frac{-e}{T} \qquad (5.1.2a)$$

ili izražavanjem perioda T preko kružne frekvencije ($T = 2\pi/\omega$):

$$I = -\frac{e\omega}{2\pi}. \qquad (5.1.2b)$$

Ako kružnu frekvenciju ω izrazimo preko orbitnog ugaonog momenta p_φ:

(D-4.6.3b) $$\omega = \frac{p_\varphi}{mr^2}$$

dobijamo da je:

$$I = -\frac{ep_\varphi}{2\pi m r^2} \tag{5.1.3a}$$

a s obzirom na to da je orbita kružna, tj. $r^2\pi = A$:

$$I = -\frac{ep_\varphi}{2mA}. \tag{5.1.3b}$$

Vezu između orbitnog magnetnog momenta i orbitnog ugaonog momenta nalazimo zamenom izraza (5.1.3b) u (5.1.1):

$$\vec{\mu}_p = -\frac{ep_\varphi}{2mA}\vec{A} = -\frac{e}{2m}p_\varphi\vec{n}$$

i pošto je $p_\varphi\vec{n} = \vec{p}_\varphi$:

$$\vec{\mu}_p = -\frac{e}{2m}\vec{p}_\varphi. \tag{5.1.4}$$

Iz poslednjeg izraza vidi se da je orbitni magnetni moment proporcionalan orbitnom ugaonom momentu i (zbog negativnog znaka) antiparalelan njemu. Odnos magnetnog i mehaničkog orbitnog momenta šematski je prikazan na Slici 5.1.1.

Koeficijent proporcionalnosti kojim se izražava odnos magnetnog i ugaonog orbitnog momenta ne zavisi od osobina orbite i kao kombinacija osnovnih konstanti (elementarnog naelektrisanja i mase elektrona) ima univerzalni karakter, jednačina (5.1.4). Iz iste jednačine neposredno dobijamo izraz za odnos magnetnog i mehaničkog orbitnog momenta:

$$\gamma_p = \frac{\vec{\mu}_p}{\vec{p}_\varphi} = -\frac{e}{2m}. \tag{5.1.5}$$

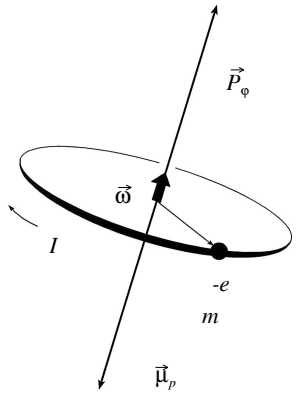
Veličina γ_p naziva se orbitni magnetomehanički odnos ili orbitni žiromagnetni odnos i ima vrednost jednaku polovini specifičnog naelektrisanja elektrona:

$$\gamma_p = -\frac{e}{2m} = -8{,}79402\times10^{10}\ \left(\frac{\mathrm{C}}{\mathrm{kg}}\right)\ \text{ili}\ \left(\frac{\mathrm{s}^{-1}}{\mathrm{T}}\right). \tag{5.1.6}$$

Orbitni magnetni i mehanički moment, kao što se vidi iz izraza (5.1.5) odnose se (do konstantnog faktora 0.5) kao naelektrisanje i masa elektrona. S obzirom na to da su masa i naelektrisanje osnovne osobine elektrona duboko povezane sa njegovim postojanjem, i veza između orbitnog magnetnog i orbitnog ugaonog momenta je neraskidiva.

Zamenom izraza (5.1.5) u (5.1.4) dobijamo da je:

$$\vec{\mu}_p = \gamma_p\vec{p}_\varphi. \tag{5.1.7}$$



Slika 5.1.1 Orbitni magnetni moment $\vec{\mu}_p$ potiče od kružnog kretanja naelektrisanja, isto kao što orbitni ugaoni moment $\vec{p}_\varphi$, potiče od kružnog kretanja mase. Zbog negativnog znaka naelektrisanja elektrona, vektori $\vec{p}_\varphi$ i $\vec{\mu}_p$ su antiparalelni.

Pošto je orbitni ugaoni moment kvantovan, to je i orbitni magnetni moment koji je njemu proporcionalan, takođe kvantovan. Najmanja jedinica ugaonog momenta (kvant ugaonog momenta) je $\hbar$. Zamenom ove vrednosti u izrazu (5.1.7) ($|\vec{p}_\varphi|_{jed.} = \hbar$), nalazimo najmanju jedinicu (kvant) orbitnog magnetnog momenta:

$$|\vec{\mu}_p|_{jed.} = -\gamma_p \hbar \tag{5.1.8}$$

koja se naziva Borov magneton i označava μ_B. Iz jednačine (5.1.8) neposredno dobijamo izraz za Borov magneton:

$$\mu_B = -\gamma_p \hbar \tag{5.1.9a}$$

koji, s obzirom na (5.1.5), može da se napiše i u obliku:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}. \tag{5.1.9b}$$

Zamenom vrednosti univerzalnih konstanti u izrazima (5.1.9), dobijamo da je:

$$\mu_B = 9,27401\times10^{-24} \quad \mathrm{JT}^{-1} \quad \text{ili} \quad Am^2. \tag{5.1.9c}$$

Preporučena vrednost iz 1998. godine je:

$$\begin{aligned} \mu_B &= 9,27400899(37)\times10^{-24} \quad \mathrm{JT}^{-1} \\ &= 5,788381749(43)\times10^{-5} \quad \mathrm{eVT}^{-1}. \end{aligned} \tag{5.1.9d}$$

Nesrećna je činjenica, koju uvek treba imati na umu, da se isti simbol μ koristi za magnetne momente μ_p i μ_s, za Borov magnetom μ_B i za magnetnu propustljivost vakuuma μ_0. Borov magneton, kao što će biti pokazano u odeljku 5.1.2, predstavlja najmanju jedinicu i za spinski magnetni moment μ_s. Zbog toga, Borov magneton predstavlja najmanju jedinicu – kvant elektronskog paramagnetizma. (Za opisivanje

magnetnih osobina atomskog jezgra koristi se odgovarajuća veličina – nuklearni magneton.)

Znajući vrednost osnovne jedinice magnetnog momenta i njegov odnos prema orbitnom ugaonom momentu lako se nalaze uslovi kvantovanja orbitnog magnetnog momenta. Prvo ćemo vezu između magnetnog i ugaonog momenta, jednačina (5.1.7), da izrazimo preko Borovog magnetona μ_B, koristeći izraz (5.1.9a):

$$\vec{\mu}_p = -\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{p}_\varphi. \tag{5.1.10a}$$

Zamenom jednačine za kvantovanje orbitnog ugaonog momenta:

$$\vec{p}_\varphi = n_\varphi \hbar \vec{n} \tag{4.6.38}$$

u jednačinu (5.1.10a), dobijamo izraz za kvantovanje orbitnog magnetnog momenta:

$$\vec{\mu}_p = -n_\varphi \mu_B \vec{n} \tag{5.1.10b}$$

ili u skalarnom obliku:

$$\mu_p = n_\varphi \mu_B. \tag{5.1.10c}$$

Dakle, orbitni magnetni moment kvantuje se na isti način kao i orbitni ugaoni moment, s tom razlikom što je kvant ugaonog momenta $\hbar$, zamenjen kvantom magnetnog momenta – Borovim magnetonom μ_B.

5.1.2 Spinski magnetni moment

U odeljku 4.8 videli smo da je za objašnjenje spektara alkalnih metala bilo potrebno pretpostaviti postojanje sopstvenog ugaonog momenta elektrona, dakle, spina. U istom smislu bilo je pretpostavljeno da je orbitni ugaoni moment jednak nuli $|\vec{l}| = 0$ kada su elektroni u *s* stanju. Iz toga sledi da je jednoelektronski atom (tačnije, atom koji, pored elektrona u popunjenim ljuskama, ima još samo jedan valentni elektron) u osnovnom stanju treba da bude dijamagnetan. Međutim, eksperimentalno je pokazano da su takvi atomi (kao što će biti opisano u odeljku 6.1) paramagnetni, tj. da imaju magnetni moment. Uzrok paramagnetizma ovih atoma jeste postojanje sopstvenog elektronskog magnetnog momenta koji je pridružen elektronskom spinu. Zbog toga bi priča o orbitnom magnetnom i mehaničkom momentu elektrona mogla da se ponovi i za sopstveni magnetni i mehanički moment elektrona. Jedina razlika je ta što se elektron umesto oko atomskog jezgra sada kreće oko sopstvene ose. Ova analogija je korisna za stvaranje zamišljene slike ali se ne treba previše oslanjati na nju jer se već u prvom pokušaju da se njome opiše odnos između spinskog magnetnog i spinskog mehaničkog momenta nailazi na ozbiljne teškoće.

Kao kod orbitnog ugaonog, $\vec{p}_\varphi$, i magnetnog, $\vec{\mu}_p$, momenta koji se javljaju zbog kretanja elektrona po orbiti oko atomskog jezgra, spinski ugaoni moment, $\vec{s}$, i spinski magnetni moment, $\vec{\mu}_s$, mogu da se smatraju posledicom rotacije mase i naelektrisanja elektrona oko sopstvene ose, Slika 5.1.2. Po ugledu na izraz (5.1.7) izveden za orbitne momente, za sopstvene momente (magnetni i mehanički) imamo:

$$\vec{\mu}_s = \gamma_s \vec{s} \tag{5.1.11}$$

gde je γ_s sopstveni (ili spinski) žiromagnetni odnos elektrona. Pošto su ovde u pitanju ista masa i isto naelektrisanje kao i kod orbitnog kretanja, očekivalo bi se da je sopstveni žiromagnetni odnos elektrona γ_s jednak orbitnom žiromagnetnom odnosu elektrona γ_p. Međutim, empirijski je nađeno da je:

$$\gamma_s = 2,0023\gamma_p \tag{5.1.12a}$$

što se ne može objasniti klasičnim predstavama o rotaciji elektrona oko sopstvene ose. Za teorijsko određivanje odnosa (5.1.12a) potrebno je uzeti u obzir kako talasnu prirodu elektrona, tako i relativističke uticaje vezane za njegovu prirodu, kao što je učinio Dirak. Na osnovu relativističke kvantne teorije, on je dobio da je:

$$\gamma_s = 2\gamma_p . \tag{5.1.12b}$$

To je dovoljno da se valjano opiše najveći broj pojava vezanih za elektrone. Mala razlika od $\approx 0,1\%$ između izraza (5.1.12a) i (5.1.12b) javlja se zbog dejstva elektrona sa sopstvenim radijacionim poljem. Ovaj uticaj Dirakova teorija ne uzima u obzir i zbog toga je izraz (5.1.12b) samo približan. Kvantna elektrodinamika koja razmatra i interakciju elektrona sa sopstvenim radijacionim poljem u stanju je da odnos (5.1.12a) kvantitativno dobije.

Odstupanje žiromagnetnog odnosa svakog sistema od orbitnog žiromagnetnog odnosa elektrona izražava se Landeovim *g*-faktorom (prema francuskom fizičaru Landeu):

$$g_x = \frac{\gamma_x}{\gamma_p} . \tag{5.1.13a}$$

Drugim rečima, *g*-faktor predstavlja žiromagnetni odnos sistema izražen u γ_p jedinicama.

Za elektron, upoređivanjem izraza (5.1.12a) i (5.1.13a), nalazimo:

$$g_s = 2,0023 \approx 2 . \tag{5.1.13b}$$

Uvođenjem *g*-faktora izrazi izvedeni za orbitne momente, ugaoni i magnetni, mogu da se uopšte i da se primene na svaki sistem, recimo, na slobodni elektron, na atomsko jezgro, itd. Pri tome, svakom paru momenata, ugaonog i magnetnog, pridružuje se odgovarajući *g*-faktor (spinski, nuklearni, itd.). Tako, zamenom odnosa (5.1.13a) u izraz (5.1.11), dobijamo:

$$\vec{\mu}_s = g_s\gamma_p\vec{s} \tag{5.1.14a}$$

ili zamenom žiromagnetnog odnosa iz (5.1.5):

$$\vec{\mu}_s = -g_s\mu_B\frac{\vec{s}}{\hbar} \tag{5.1.14b}$$

odnosno:

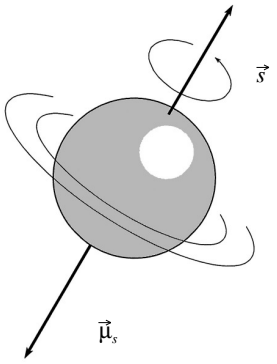
$$\mu_s = -\frac{e\hbar}{2m}. \tag{5.1.14c}$$

Na osnovu izraza (5.1.12b) i (5.1.5) nalazimo da je spinski žiromagnetni odnos elektrona približno jednak njegovom specifičnom naelektrisanju:

$$\gamma_s = -\frac{e}{m} \tag{5.1.15a}$$

$$\gamma_s = -1,7588 \times 10^{11} \quad Ckg^{-1}. \tag{5.1.15b}$$

Spinski magnetni i ugaoni moment elektrona odnose se međusobno kao naelektrisanje i masa elektrona, pa je zbog toga njihova veza, kao i njihovo postojanje uopšte, osnovna osobina elektrona. Kao kod orbitnih momenata i spinski magnetni i ugaoni momenti elektrona su antiparalelni, Slika 5.1.2.



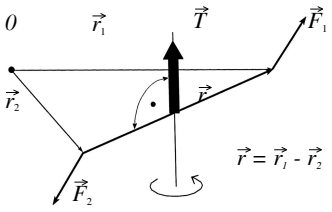
Slika 5.1.2 Spinski ugaoni i magnetni moment elektrona.

5.2 PRECESIJA I ORIJENTACIJA (ORBITNOG I SPINSKOG) MAGNETNOG MOMENTA U MAGNETNOM POLJU

DODATAK 5.2

D-5.2.1 Moment sprega

Spregom sila nazivamo dve jednake sile, paralelne i suprotnog smera, koje ne deluju duž jedne iste prave, Slika D-5.2.1. Moment sprega sila jednak je zbiru momenata svake sile posebno i ne zavisi od tačke u odnosu na koju se momenti sile izračunavaju.



Slika D-5.2.1 Moment sprega javlja se ako paralelne sile $\vec{F}_1$ i $\vec{F}_2$ jednakih intenziteta, deluju u suprotnim smerovima, sa napadnim tačkama na rastojanju $|\vec{r}|$ i ako se njihov pravac delovanja ne poklapa sa pravcem vektora $\vec{r}$.

Na Slici D-5.2.1 momenti sila izračunavaju se u odnosu na proizvoljno izabranu tačku *O*. Tada je:

$$\vec{T}_1 = \vec{r}_1 \times \vec{F}_1 \quad \text{i} \quad \vec{T}_2 = \vec{r}_2 \times \vec{F}_2 . \tag{D-5.2.1}$$

i:

$$\vec{T} = \vec{T}_1 + \vec{T}_2 = \vec{r}_1 \times \vec{F}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{F}_2 . \tag{D-5.2.2}$$

Iz definicije sprega slede dva uslova:

$$\vec{F}_1 = -\vec{F}_2 \quad \text{i} \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 .$$

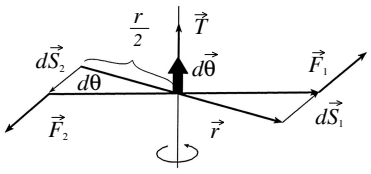
Poslednji uslov očigledan je sa Slike D-5.2.1, sa koje vidimo da vektor $\vec{r}$ kojim se određuje koordinata napadne tačke sile $\vec{F}_1$ u odnosu na napadnu tačku sile $\vec{F}_2$, ne zavisi od izbora tačke u odnosu na koju se računa moment. Unošenjem ova dva uslova u izraz (D-5.2.2), dobijamo:

$$\vec{T} = \vec{r}_1 \times \vec{F}_1 - \vec{r}_2 \times \vec{F}_1 = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \vec{F}_1 = \vec{r} \times \vec{F}_1 . \tag{D-5.2.3}$$

Dakle, moment sprega sila koje deluju na rastojanju $\vec{r}$ jednak je momentu koji nastaje delovanjem samo jedne sile na istom kraku $\vec{r}$.

D-5.2.2 Rad sprega sila

Moment sprega sila izaziva rotaciju tela pri čemu spreg vrši rad, Slika D-5.2.2. Rad koji izvrši spreg $\vec{T}$ pri rotaciji tela za beskonačno mali ugao $d\vec{\theta}$ izračunavamo preko rada koji izvrše sile $\vec{F}_1$ i $\vec{F}_2$ na beskonačno malim putevima $d\vec{s}_1$ i $d\vec{s}_2$. Pri tome je diferencijalni put $d\vec{s}_1$ povezan sa diferencijalnim uglom $d\vec{\theta}$ jednačinom (videti Sliku D-5.2.2):



Slika D-5.2.2 Moment sprega dovodi do rotacije tela oko središnje tačke na $\vec{r}/2$.

$$d\vec{s}_1 = d\vec{\theta} \times \frac{\vec{r}}{2} . \tag{D-5.2.4}$$

Rad $d\vec{A}_1$ koji izvrši sila $\vec{F}_1$ na putu $d\vec{s}_1$ je:

$$dA_1 = \vec{F}_1 \cdot d\vec{s}_1$$

a rad koji izvrši druga sila:

$$dA_2 = \vec{F}_2 \cdot d\vec{s}_2 \ .$$

Ukupni rad sprega jednak je njihovom zbiru:

$$dA = dA_1 + dA_2 = \vec{F}_1 \cdot d\vec{s}_1 + \vec{F}_2 \cdot d\vec{s}_2 \ .$$

Pošto je $\vec{F}_1 = -\vec{F}_2$ (po definiciji sprega) i $d\vec{s}_1 = -d\vec{s}_2$ (putevi su paralelni odgovarajućim silama) iz poslednjeg izraza dobijamo da je:

$$dA = 2\vec{F}_1 \cdot d\vec{s}_1$$

a zamenom iz (D-5.2.4):

$$dA = 2\vec{F}_1 \cdot \left(d\vec{\theta} \times \frac{\vec{r}}{2}\right) = 2d\vec{\theta} \cdot \left(\frac{\vec{r}}{2} \times \vec{F}_1\right) = d\vec{\theta} \cdot (\vec{r} \times \vec{F}_1) \ .$$

Konačan izraz dobijamo zamenom vektorskog proizvoda jednačinom (D-5.2.3):

$$dA = \vec{T} \cdot d\vec{\theta} \ . \qquad \text{(D-5.2.5)}$$

Ako su sile $\vec{F}$ potencijalne, tada je izvršeni rad jednak potencijalnoj energiji:

$$dA = dU.$$

Promena potencijalne energije pri rotaciji za konačni ugao, na primer od θ_1 do θ_2, dobija se integraljenjem poslednjeg izraza:

$$U_2 - U_1 = \int_{\theta_1}^{\theta_2} \vec{T} \cdot d\vec{\theta} \ . \qquad \text{(D-5.2.6a)}$$

Pošto su vektori $\vec{T}$ i $d\vec{\theta}$ paralelni, izraz (D-5.2.6a) se neposredno prevodi u skalarni oblik $(\vec{T}d\vec{\theta} = Td\theta)$. Zamenom apsolutne vrednosti vektora $\vec{T}$ iz jednačine (D-5.2.3) u skalarni oblik izraza (D-5.2.6), dobijamo da je:

$$U_2 - U_1 = \int_{\theta_1}^{\theta_2} F_1 r \sin\theta d\theta \qquad \text{(D-5.2.6b)}$$

ili posle integraljenja:

$$U_2 - U_1 = -F_1 r(\cos\theta_2 - \cos\theta_1) \ .$$

Ugao θ je ugao između vektora $\vec{F}_1$ i $\vec{r}$; za $\theta_1 = \pi/2$ $U_1 = 0$, pa je:

$$U = -F_1 r \cos\theta \ . \qquad \text{(D-5.2.7a)}$$

Poslednji izraz predstavlja zavisnost potencijalne energije tela od ugla u odnosu na krak $\vec{r}$ pod kojim deluju potencijalne sile koje obrazuju spreg. Kada sile deluju pod pravim uglom ($\theta = \pi/2$), potencijalna energija jednaka je nuli, a moment sprega je najveći. Kada su sile paralelne kraku $\vec{r}$ ($\theta = 0, \pi$) moment sprega je nula; tada potencijalna energija dostiže krajnje vrednosti – najveću za $\theta = \pi$ i najmanju za $\theta = 0$.

Sistem na koji deluje spreg sila spontanim prelazom u najmanju potencijalnu energiju, usmerava se tako da krak sile $\vec{r}$ postane paralelan pravcu delovanja potencijalnih sila $\theta = 0$.

Izraz (D-5.2.7a), predstavlja skalarni proizvod vektora $\vec{F}_1$ i $\vec{r}$, pa sažetije može da se napiše u vektorskom obliku:

$$U = -\vec{F}_1 \cdot \vec{r}. \qquad \text{(D-5.2.7b)}$$

D-5.2.3 Električni dipol u homogenom električnom polju

Osobine električnog dipola u homogenom električnom polju ovde razmatramo zbog bliske veze sa osobinama magnetnog momenta (magnetnog dipola) u homogenom magnetnom polju.

Električni dipol obrazuju dva naelektrisanja + q i - q razmaknuta na rastojanje $|\vec{r}|$, Slika D-5.2.3. Dipolni moment $\vec{\mu}$ jednak je proizvodu naelektrisanja q i vektora rastojanja $\vec{r}$:

$$\vec{\mu} = q\vec{r} \qquad \text{(D-5.2.8)}$$

gde se vektorom $\vec{r}$ određuje položaj pozitivnog naelektrisanja u odnosu na negativno, Slika D-5.2.3.

U električnom polju na naelektrisanja $\pm q$ deluju sile $\vec{F}_+$ i $\vec{F}_-$.

$$\vec{F}_\pm = \pm q\vec{E} \qquad \text{(D-5.2.9)}$$

koje su međusobno paralelne, a suprotnog su smera i pošto je polje homogeno, sile su jednakog intenziteta. Zbog toga sile $\vec{F}_+$ i $\vec{F}_-$, formiraju spreg čiji je moment, saglasno izrazu (D-5.2.3):

$$\vec{T} = \vec{r} \times \vec{F}_+ \quad . \qquad \text{(D-5.2.10a)}$$

Zamenom izraza za silu (D-5.2.9), iz poslednje jednačine dobijamo:

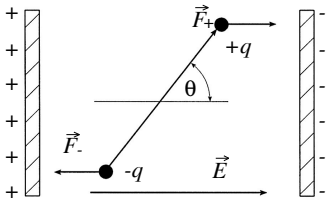
$$\vec{T} = q\vec{r} \times \vec{E} \qquad \text{(D-5.2.10b)}$$

i konačno, s obzirom na definiciju dipolnog momenta (D-5.2.8):

$$\vec{T} = \vec{\mu} \times \vec{E}. \qquad \text{(D-5.2.10c)}$$

Potencijalnu energiju električnog dipola u homogenom električnom polju dobijamo neposredno iz izraza (D-5.2.7):

(D-5.2.7b) $$U = -\vec{F}_+ \cdot \vec{r} = -q\vec{E} \cdot \vec{r} = -q\vec{r} \cdot \vec{E} = -\vec{\mu} \cdot \vec{E} \qquad \text{(D-5.2.11a)}$$



Slika D-5.2.3 Spreg sila koji se javlja kada se dipol unese u homogeno električno polje nastoji da usmeri dipol paralelno primenjenom polju.

ili u skalarnom obliku:

$$U = -\mu E\cos\theta \qquad \text{(D-5.2.11b)}$$

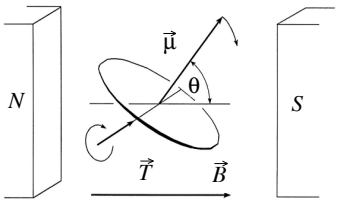
gde je θ ugao koji zaklapa električni dipol sa vektorom električnog polja.

Prema tome, moment sile koji deluje na električni dipol u električnom polju jednak je vektorskom proizvodu dipolnog momenta i vektora električnog polja. Potencijalna energija električnog dipola u homogenom električnom polju jednaka je skalarnom proizvodu dipolnog momenta i vektora električnog polja, sa promenjenim znakom. Otuda sledi da električni dipol ima najmanju energiju kada je usmeren paralelno električnom polju.

D-5.2.4 Strujna kontura u homogenom magnetnom polju ili magnetni dipol u homogenom magnetnom polju

Magnetni moment može da se razmatra kao magnetni dipol, na sličan način kao što je razmatran i električni dipol i njegov moment. Mada je zbog vrtložne prirode magnetnog polja ova sličnost samo prividna, ona je vrlo korisna pošto veliki broj zakonitosti iz elektrostatike i magnetizma može da se objasni na isti način. U prethodnom odeljku videli smo da se električni dipol u električnom polju spontano usmerava paralelno tom polju. Na isti način, magnetni dipol (magnetni moment) usmerava se paralelno magnetnom polju koje deluje na njega. (Na tom principu radi kompas sa magnetnom iglom.)

Pošto strujna kontura, saglasno izrazu (D-5.1.1), ima magnetni moment, $\vec{\mu}$, to se ona u polju magnetne indukcije, $\vec{B}$, ponaša slično električnom dipolu u električnom polju, Slika D-5.2.4.



Slika D-5.2.4 Na strujnu konturu u homogenom magnetnom polju deluje moment sprega koji nastoji da magnetni moment $\vec{\mu}$ usmeri paralelno spoljašnjem magnetnom polju $\vec{B}$.

Dakle, na strujnu konturu u magnetnom polju deluje spreg sila, pa kao i u izrazu (D-5.2.10c) imamo:

$$\vec{T} = \vec{\mu}\times\vec{B} = IA\vec{n}\times\vec{B} \qquad \text{(D-5.2.12)}$$

a slično izrazima (D-5.2.11):

$$U = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} \qquad \text{(D-5.2.13a)}$$

ili u skalarnom obliku:

$$U = -\mu B \cos\theta . \qquad \text{(D-5.2.13b)}$$

Za orbitni i spinski magnetni moment moglo bi se očekivati da će se, kao i makroskopske strujne konture, usmeravati u spoljašnjem magnetnom polju. Međutim, interakcija ovih momenata sa spoljašnjim magnetnim poljem znatno je složenija, što je posledica kako kvantne prirode mikroskopskih pojava, tako i činjenice da su ovi magnetni momenti spregnuti sa odgovarajućim ugaonim (mehaničkim) momentima, kako je već opisano u prethodnom poglavlju.

Pri opisivanju dejstva magnetnog polja na magnetne momente atoma poreklo magnetnog momenta ne igra nikakvu ulogu. Fizička slika dobijena za orbitni magnetni moment ista je kao ona koja se dobija za spinski magnetni moment. Jedina razlika javlja se zbog različitih žiromagnetnih odnosa i kvantnih brojeva kojima se izražava kvantovanje. Zbog toga će u nastavku biti reči uglavnom o orbitnom magnetnom momentu. Osobine spinskog magnetnog momenta u magnetnom polju dobijaju se zamenom orbitnog žiromagnetnog odnosa spinskim i orbitnog magnetnog kvantnog broja spinskim magnetnim kvantnim brojem.

5.2.1 Precesija orbitnog magnetnog momenta u magnetnom polju

U homogenom magnetnom polju sa indukcijom $\vec{B}$, na orbitni magnetni moment $\vec{\mu}_p$, deluje moment sprega sile $\vec{M}$, koji nastoji da usmeri vektor $\vec{\mu}_p$ paralelno polju $\vec{B}$:

(D-5.2.12)
$$\vec{M} = \vec{\mu}_p \times \vec{B} . \qquad (5.2.1)$$

Magnetni moment imao bi najmanju potencijalnu energiju kada bi bio paralelan polju (videti odeljak D-5.2.4). Pošto je orbitnom magnetnom momentu pridružen orbitni ugaoni moment, $\vec{p}_\varphi$, magnetni moment neće tek tako da se usmeri duž pravca delovanja polja $\vec{B}$. Naime, s obzirom na to da je:

(D-4.6.5)
$$\vec{M} = \frac{d\vec{p}_\varphi}{dt}$$

i:

(5.1.7)
$$\vec{\mu} = \gamma_p \vec{p}_\varphi$$

nalazimo da je jednačina kretanja ugaonog momenta $\vec{p}_\varphi$ oblika:

$$\frac{d\vec{p}_\varphi}{dt} = \gamma_p \vec{p}_\varphi \times \vec{B} . \qquad (5.2.2)$$

Dobijena diferencijalna jednačina istog je tipa kao i jednačina (D-2.2.13), pri čemu postoji jednoznačna veza između njihovih veličina:

$$\vec{p}_\varphi = \vec{\beta}, \quad \vec{B} = \vec{B}, \quad \gamma_p = k . \qquad (5.2.3)$$

Rešenja jednačine kretanja (5.2.2) dobijamo zamenom odnosa (5.2.3) u rešenjima (D-2.2.13), pa je:

$$p_x = |\vec{p}_\varphi| \sin\theta \cos(\gamma_p B_z t) \tag{5.2.4a}$$

$$P_y = -|\vec{p}_\varphi| \sin\theta \sin(\gamma_p B_z t) = |\vec{p}_\varphi| \sin\theta \sin(-\gamma_p B_z t) \tag{5.2.4b}$$

$$p_z = |\vec{p}_\varphi| \cos\theta = const. \tag{5.2.4c}$$

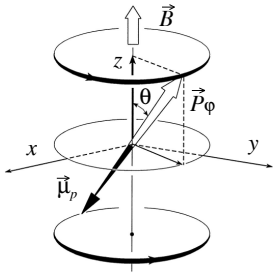
θ je ugao između pravca magnetnog polja (z-ose) i vektora ugaonog momenta. Iz poslednjeg izraza vidi se da se projekcija ugaonog momenta na pravac delovanja magnetnog polja tokom vremena ne menja ($\theta = const.$). Odatle zaključujemo da magnetni moment u magnetnom polju ne menja smer. Međutim, iz oblika rešenja (5.2.4a,b) (videti odeljak D-2.2.4) zaključujemo da projekcija vektora ugaonog momenta $\vec{p}_\varphi$ na xy-ravan, kruži u toj ravni frekvencijom:

$$\omega_{L,p} = -\gamma_p B_z . \tag{5.2.5a}$$

Slaganjem kretanja projekcija na ose x i y (dakle, u xy-ravni) i projekcije na z-osu, dobijamo sliku o kretanju vektora $\vec{p}_\varphi$ kao celine: vektor $\vec{p}_\varphi$ (znači i vektor $\vec{\mu}_\varphi$) precesuje oko pravca spoljašnjeg magnetnog polja frekvencijom koja je određena izrazom (5.2.5a). Ova frekvencija, $\omega_{L,p}$, naziva se Larmorova frekvencija (otuda indeks L) prema istraživaču koji je prvi razmatrao ovaj problem. S obzirom na to da je žiromagnetni odnos orbite **negativan**, jednačina (5.1.6), Larmorova frekvencija elektronske orbite je **pozitivna**. To znači da su vektori $\vec{\omega}_{L,p}$ i $\vec{B}$ paralelni, pa je vektorski oblik poslednje jednačine:

$$\vec{\omega}_{L,p} = -\gamma_p \vec{B} . \tag{5.2.5b}$$

Orbitni momenti, ugaoni i magnetni, precesuju oko pravca spoljašnjeg polja u smeru koji je određen pravilom desne ruke, kao što je prikazano na Slici 5.2.1.



Slika 5.2.1 Elektronska orbita uneta u magnetno polje $\vec{B}$ precesuje oko pravca polja stalnom ugaonom brzinom (frekvencijom) $\omega_{L,p}$. Pri tom se projekcija ugaonog momenta na pravac spoljašnjeg magnetnog polja tokom vremena ne menja.

5.2.2 Orijentacija orbitnog momenta u magnetnom polju

Za potpunu sliku kretanja orbitnog magnetnog i orbitnog mehaničkog momenta u spoljašnjem magnetnom polju potrebno je razmotriti i pitanje ugla θ koji

orbitni ugaoni moment zaklapa sa pravcem spoljašnjeg polja. U odeljku 4.6.4 videli smo da orijentacija vektora $\vec{p}_\varphi$ u prostoru nije proizvoljna, već je određena uslovima prostornog kvantovanja. Kada se u prostoru definiše izvestan pravac (ovde određen spoljašnjim poljem $\vec{B}$), projekcija ugaonog momenta na taj pravac je kvantovana. To znači da su dozvoljene samo diskretne vrednosti ugla θ koji sa spoljašnjim poljem zaklapa vektor $\vec{p}_\varphi$ (i vektor $\vec{\mu}_p$). Dozvoljene vrednosti ugla θ određene su odnosom magnetnog kvantnog broja m i azimutalnog kvantnog broja n_φ:

(4.6.49)
$$\cos\theta = \frac{m}{n_\varphi}. \tag{5.2.6}$$

Zamenom ovog uslova u izrazu (5.2.4c) dobijamo da je:

$$p_z = |\vec{p}_\varphi|\frac{m}{n_\varphi} \tag{5.2.7}$$

ili s obzirom na izraz:

(4.6.38)
$$|\vec{p}_\varphi| = n_\varphi \hbar$$

dobijamo uslov za kvantovanje projekcije ugaonog momenta na pravac spoljašnjeg polja (z-ose):

$$p_z = m\hbar$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm n_\varphi. \tag{5.2.8}$$

Magnetni moment $\vec{\mu}_p$ koji je pridružen orbitnom ugaonom momentu mora da bude kvantovan na isti način:

(5.1.7)
$$\vec{\mu}_p = \gamma_p \vec{p}_\varphi.$$

Projektovanjem vektora $\vec{\mu}_p$ i $\vec{p}_\varphi$ na z-osu dobijamo:

$$\mu_{p,z} = +\gamma_p p_z \tag{5.2.9a}$$

a zamenom p_z iz jednačine (5.2.8):

$$\mu_{p,z} = m\gamma_p\hbar. \tag{5.2.9b}$$

Najzad, uslov za kvantovanje projekcije orbitnog magnetnog momenta dobijamo uvođenjem Borovog magnetona saglasno jednačini (5.1.9a):

$$\mu_{p,z} = -m\mu_B$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm n_\varphi. \tag{5.2.10}$$

Pošto vektor $\vec{\mu}_p$ precesuje oko pravca polja $\vec{B}$, njegove *x*-komponente, $\vec{\mu}_{p,x}$ u konačnom vremenskom intervalu, uzajamno se poništavaju. Isto važi i za *y*-komponente, $\vec{\mu}_{p,y}$. To znači da se poprečna (transverzalna) komponenta magnetnog momenta (poprečna u odnosu na spoljašnje polje $\vec{B}$), $\vec{\mu}_{p,T} = \vec{\mu}_{p,x} + \vec{\mu}_{p,y}$, u konačnom vremenskom intervalu usrednjava na nulu i da zbog toga ne može da se opazi eksperimetalno. Međutim, uzdužna (longitudinalna) komponenta magnetnog momenta, $\vec{\mu}_{p,z}$, za koju smo videli da se ne menja tokom vremena i da ima diskretne vrednosti, može da se eksperimentalno opazi i meri. To neposredno sledi iz izraza za energiju interakcije magnetnog polja i magnetnog momenta:

(D-5.2.13) $$U = -\vec{\mu}_p \cdot \vec{B} = -\mu_p B\cos\theta. \qquad (5.2.11a)$$

Imajući na umu da je $\mu_p\cos\theta = \mu_{p,z}$, potencijalnu energiju magnetnog momenta u magnetnom polju možemo da izrazimo kao:

$$U = -\mu_{p,z}B \qquad (5.2.11b)$$

ili zamenom $\mu_{p,z}$ iz jednačine (5.2.10):

$$U = m\mu_B B. \qquad (5.2.11c)$$

Ovaj izraz predstavlja novi način za izražavanje prostornog kvantovanja i za objašnjavanje kvantnog broja *m*. Magnetnim kvantnim brojem *m* kvantuje se energija interakcije orbitnog magnetnog momenta i spoljašnjeg magnetnog polja.

5.2.3 Precesija i orijentacija spinskog magnetnog momenta u spoljašnjem magnetnom polju

Videli smo da se elektronska orbita, zapravo orbitni momenti (mehanički i magnetni) jednovremeno orijentišu pod određenim uglom u odnosu na spoljašnje magnetno polje i precesuju oko njega. Diskretna orijentacija u magnetnom polju posledica je interakcije magnetnog momenta i magnetnog polja i kvantovanja momenta duž pravca magnetnog polja. Precesija momenata posledica je slaganja momenta (sprega) sile (nastalog delovanjem magnetnog polja na magnetni moment) i orbitnog ugaonog momenta.

Zbog bliske analogije između orbitnih i spinskih momenata može se očekivati da će spinski momenti u magnetnom polju da se ponašaju slično orbitnim momentima. Larmorovu frekvenciju spina elektrona dobijamo iz izraza (5.2.5a) ako orbitni zamenimo spinskim žiromagnetnim odnosom:

$$\omega_{L,s} = -\gamma_s B_z \qquad (5.2.12a)$$

odnosno, u vektorskom obliku:

$$\vec{\omega}_{L,s} = -\gamma_s \vec{B}. \qquad (5.2.12b)$$

Po ugledu na izraz za kvantovanje orbitnog ugaonog momenta, (5.2.8), za spinski ugaoni moment nalazimo:

$$s_z = m_s\hbar, \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} \tag{5.2.13a}$$

gde je:

$$m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}. \tag{5.2.13b}$$

Prostorno kvantovanje spinskog magnetnog momenta mora da bude isto kao i kvantovanje spinskog ugaonog momenta. S obzirom na njihovu vezu:

(5.1.14b) $$\vec{\mu}_s = -g_s\mu_B\frac{\vec{s}}{\hbar}$$

nalazimo:

$$\vec{\mu}_s = \gamma_s\vec{s}.$$

Projektovanjem oba spinska momenta, magnetnog, $\vec{\mu}_s$ i mehaničkog, $\vec{s}$, na z-osu dobijamo:

$$\mu_{s,z} = -g_s\mu_B\frac{s_z}{\hbar} \tag{5.2.14a}$$

a zamenom s_z iz (5.2.13a):

$$\mu_{s,z} = -g_s\mu_B m_s. \tag{5.2.14b}$$

Koristeći i dalje sličnosti, za potencijalnu energiju spinskog magnetnog momenta u magnetnom polju, po ugledu na izraz (5.2.11a), nalazimo:

$$U = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} \tag{5.2.15a}$$

a prema (5.2.11b):

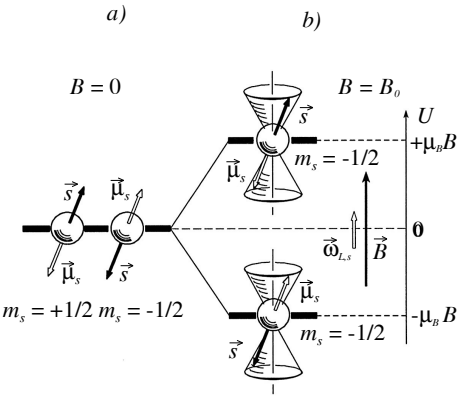
$$U = -\mu_{s,z}B. \tag{5.2.15b}$$

Po ugledu na (5.2.11c), zamenom projekcije magnetnog momenta iz (5.2.14b) sledi:

$$U = +g_s m_s\mu_B B. \tag{5.2.15c}$$

Delovanje magnetnog polja na spinske momente šematski je prikazano na Slici 5.2.2. U magnetnom polju spinski, mehanički i magnetni momenti precesuju sopstvenom Larmorovom frekvencijom koja je, u datom magnetnom polju, g_s puta (približno dva puta) veća od odgovarajuće frekvencije orbitnih momenata. Pri tome, spinski magnetni moment postavlja se u jednu od dve moguće orijentacije koje imaju različite energije određene izrazom (5.2.15c).

Dakle, magnetno polje uklanja degeneraciju i dovodi do cepanja spinskih stanja na dva energijska nivoa. Cepanje je proporcionalno jačini magnetnog polja (tačnije, magnetnoj indukciji). Cepanje energijskih nivoa prouzrokovano je magnetnim međudejstvom (magnetnom interakcijom).



Slika 5.2.2 Precesija i orijentacija spinskih, momenata, ugaonog $\vec{s}$ i magnetnog $\vec{\mu}_s$, u spoljašnjem magnetnom polju $\vec{B}$: a) u odsustvu magnetnog polja dva spinska stanja $m_s = +^1/_2$ i $m_s = -^1/_2$ su degenerisana – bez obzira na orijentaciju njihove energije su jednake. Van magnetnog polja nema precesije; b) magnetno polje uklanja degeneraciju energijskih nivoa – različite orijentacije spina imaju različite potencijalne energije. Kada je spinski magnetni moment „paralelan" polju, $m_s = -^1/_2$, njegova energija je najmanja, $U = -\mu_B B$, a kada je „antiparalelan", $m_s = +^1/_2$, energija mu je najveća, $U = +\mu_B B$. Zbog kvantovanja projekcije momenta na pravac *z*-ose, ostale orijentacije nisu dozvoljene. To znači da se u magnetnom polju svako spinsko stanje cepa na dva nivoa. Nezavisno od orijentacije spinski momenti precesuju u istom smeru oko pravca spoljašnjeg magnetnog polja.

5.3 SPIN-ORBITNA INTERAKCIJA

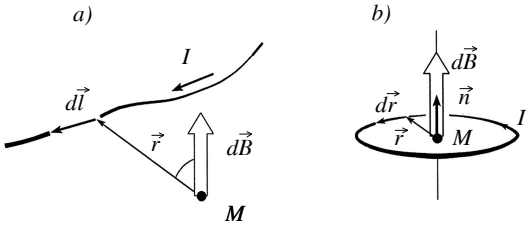
DODATAK 5.3

D-5.3.1 Magnetno polje strujne konture (Amper-Laplasov i/ili Bio-Savarov zakon)

Magnetna indukcija $d\vec{B}$ u tački *M* na rastojanju $\vec{r}$ od elementa strujne konture proizvoljnog oblika $d\vec{l}$, kroz koju protiče struja *I,* Slika D-5.3.1a, određena je izrazom:

$$d\vec{B} = \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)\vec{r} \times d\frac{\vec{l}}{|\vec{r}|^3} I. \qquad \text{(D-5.3.1)}$$

To je Amper-Laplasov obrazac ili Bio-Savarov zakon; μ_0 je magnetna propustljivost slobodnog prostora (vakuuma) i iznosi $4\pi \times 10^{-7}$ H/m (Henrija po metru).



Slika D-5.3.1 Uz definiciju Bio-Savarovog zakona: a) komponenta magnetne indukcije $d\vec{B}$ (u proizvoljnoj tački, *M*, u okolini strujne konture proizvoljnog oblika) koja potiče od elementa strujne konture $d\vec{l}$, normalna je na ravan u kojoj se nalaze vektori $\vec{r}$ i $d\vec{l}$; b) kod zatvorene kružne konture, magnetna indukcija u centru konture proporcionalna je jačini struje, a obrnuto proporcionalna poluprečniku konture. Vektor indukcije je normalan na ravan konture.

Indukcija polja $d\vec{B}$ u centru zatvorene strujne konture poluprečnika $\vec{r}$, koje potiče od elementa konture $d\vec{r}(\vec{d}r = d\vec{l})$, dobija se iz izraza (D-5.3.1) zamenom odgovarajućih uslova, Slika D-5.3.1b:

$$\vec{r} \perp d\vec{r}$$

$$\vec{r} \times d\vec{r} = r\, dr\, \vec{n}$$

$$d\vec{B} = \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right) I \frac{dr}{r^2}\, \vec{n}. \qquad \text{(D-5.3.2)}$$

Vektor $\vec{n}$ je jedinični vektor normalan na ravan strujne konture. Njegov smer određen je tokom električne struje po pravilu desne ruke. Ukupnu magnetnu indukciju u centru strujne konture dobijamo itegraljenjem poslednjeg izraza po krugu:

$$\vec{B} = \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right) \int I \frac{dr}{r^2}\, \vec{n}. \qquad \text{(D-5.3.3)}$$

Pošto je $I = const.$, $r = const.$ i $dr = rd\theta$, iz (D-5.3.3) integraljenjem nalazimo:

$$\vec{B} = \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right) \frac{2\pi l}{r}\, \vec{n}\ . \qquad \text{(D-5.3.4)}$$

Prema tome, električna struja I, koja protiče kroz zatvorenu strujnu konturu poluprečnika, r, u njenom središtu indukuje magnetno polje čija je indukcija proprocionalna jačini struje, a obrnuto proprocionalna poluprečniku konture.

U poglavlju 4.6 videli smo da je za empirijsko opisivanje spektara alkalnih metala bilo potrebno da se pretpostavi dubletna priroda *p, d, f*, itd. elektronskih nivoa, što je opravdano uvođenjem pojma spina. Drugim rečima, bilo je neophodno da se pretpostavi postojanje dva energijska stanja elektrona za datu kombinaciju kvantnih brojeva n, n_φ i m.

U svetlu razmatranja izloženog u odeljku 5.2.3, iz kojeg sledi da spoljašnje magnetno polje uklanja degeneracija spinskih nivoa elektrona, možemo da zaključimo da u elektronskim stanjima *p, d, f, ...*, itd., ali ne i u stanju *s*, **postoji unutrašnje, lokalno, magnetno polje atoma.** To nam pruža dobru osnovu za razmatranje fizičke suštine cepanja termova alkalnih metala (zapravo termova svih atoma, samo što se kod alkalnih metala cepanje uočava već na prvi pogled). Problem se svodi na pitanje porekla sopstvenog magnetnog polja atoma i interakcije spinskog magnetnog momenta i tog polja.

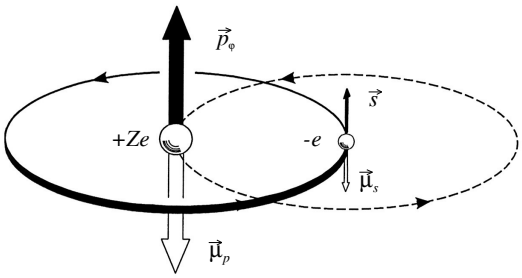
5.3.1 Poreklo lokalnog magnetnog polja

U odeljku 5.1.1 videli smo da elektron koji kruži oko jezgra, dovodi do pojave orbitnog magnetnog momenta $\vec{\mu}_p$, jednačina (5.1.4). Ista pojava može da se opiše na ekvivalentan način preko Bio-Savarovog zakona (videti odeljak D-5.3.1): elektron

koji kruži oko atomskog jezgra, na položaju jezgra indukuje lokalno magnetno polje koje je proporcionalno jačini struje, a obrnuto proporcionalno poluprečniku orbite.

Nas, međutim, zanima postoji li, i koliko je, polje na položaju elektrona, s obzirom na to da ispitujemo uzajamno dejstvo lokalnog magnetnog polja i spina elektrona. Zato ćemo isti proces, kruženja elektrona oko jezgra posmatrati iz drugog ugla, tj. iz sistema u kome elektron miruje. Posmatrano sa položaja elektrona, Slika 5.3.1, izgleda kao da pozitivno naelektrisano jezgro kruži oko elektrona. (Ovo je donekle slično utisku koju posmatrač sa Zemlje ima pri posmatranju Sunca. Njemu izgleda da Zemlja miruje, a da se Sunce okreće oko Zemlje.) Dakle, iz referentnog sistema elektrona, atomsko jezgro sa naelektrisanjem $+Ze$, kruži oko elektrona koji se nalazi u središtu orbite. (Zamišljamo da je orbita kružna.) Prema Bio-Savarovom zakonu kruženje pozitivnog jezgra oko elektrona na mestu elektrona dovodi do pojave lokalnog magnetnog polja čiju indukciju dobijamo iz Amper-Laplasove jednačine:

$$\vec{B}_e = \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)\frac{2\pi I}{r}\vec{n}. \tag{5.3.1}$$



Slika 5.3.1 Poreklo magnetnog polja na mestu elektrona. Polje nastaje kao posledica kruženja elektrona oko naelektrisanog jezgra. Može da se objasni posmatranjem iste situacije sa mesta elektrona. U sistemu u kojem elektron miruje, jezgro kruži oko elektrona.

Indeksom e kod magnetne indukcije $\vec{B}_e$ označavamo da se magnetna indukcija posmatra iz sistema u kome elektron miruje. Ovde je μ_0 magnetna propustljivost vakuuma, I jačina struje koja nastaje usled „kruženja" jezgra oko elektrona, r poluprečnik orbite i $\vec{n}$ jedinični vektor normalan na ravan „orbite" jezgra, a čiji je smer određen pravilom desne ruke u odnosu na tok struje I.

Jačinu struje koju stvara naelektrisanje $+Ze$, kružeći oko elektrona u orbiti poluprečnika r, kružnom frekvencijom ω, dobijamo iz jednačine za elektronsku orbitnu struju koja je izvedena u odeljku 5.1.1:

(5.1.3a) $$I = -\frac{p_\varphi e}{2\pi m r^2}$$

zamenom naelektrisanja elektrona $-e$, naelektrisanjem jezgra $+Ze$:

$$I = +\frac{Zep_\varphi}{2\pi m r^2}. \tag{5.3.2}$$

Uvrštavanjem struje iz (5.3.2) u (5.3.1), posle skraćivanja nalazimo:

$$\vec{B}_e = \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)\frac{Ze}{mr^3}p_\varphi\vec{n}$$

i zamenom $p_\varphi\vec{n} = \vec{p}_\varphi$:

$$\vec{B}_e = \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)\frac{Ze}{mr^3}\ \vec{p}_\varphi . \tag{5.3.3}$$

Poslednji izraz predstavlja magnetnu indukciju lokalnog polja, na mestu elektrona koje je nastalo „kruženjem" jezgra, a viđena iz referentnog sistema u kojem elektron miruje.

Na prvi pogled, može da se učini nevažnim iz kog referentnog sistema se posmatra polje. Međutim, s obzirom na to da magnetna indukcija zavisi od jačine struje, dakle od brzine kretanja naelektrisanja, izbor referentnog sistema iz koga se meri ta brzina veoma je značajan. To znači da je polje $\vec{B}_e$, posmatrano iz referentnog sistema u kome elektron miruje, različito od tog polja $\vec{B}_p$ posmatranog iz sistema u kome atomsko jezgro miruje. U ovom slučaju, lokalno magnetno polje na mestu elektrona treba da se posmatra iz referentnog sistema u kome jezgro miruje jer je to sistem iz kojeg se atom normalno posmatra i iz kojeg se o atomu dobijaju eksperimentalni podaci.

Tačno izvođenje izraza za pretvaranje polja iz jednog sistema u drugi prilično je složeno i nećemo ga ovde izlagati. Dovoljno je da se kaže da se zbog relativističkog efekta poznatog kao Tomasova precesija, u tom izrazu javlja činilac $^1/_2$, tzv. Tomasov faktor, tako da se dobija:

$$\vec{B}_p = \frac{1}{2}\vec{B}_e . \tag{5.3.4}$$

Grubo rečeno, Tomasov faktor javlja se zbog toga što referentni sistem u kojem elektron miruje ne samo da rotira oko jezgra nego još rotira i oko elektrona. Pri svakom krugu koji elektron opiše oko jezgra, sistem napravi jedan krug oko elektrona. Zbog toga je prividna frekvencija „kruženja" jezgra, posmatrana iz sistema u kojem elektron miruje, dva puta veća od prave „frekvencije" koja, u stvari, stvara polje. Tomasov faktor ispravlja ovu razliku.

Veličinu magnetne indukcije na mestu elektrona iz referentnog sistema u kome jezgro miruje, nalazimo unošenjem odnosa (5.3.4) u izraz (5.3.3):

$$\vec{B}_p = \frac{1}{2}\left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)\frac{Ze}{mr^3}\ \vec{p}_\varphi . \tag{5.3.5}$$

Dakle, lokalno magnetno polje $\vec{B}_p$, na mestu elektrona koji se kreće u orbiti sa orbitnim ugaonim momentom $\vec{p}_\varphi$, proporcionalno je naelektrisanju jezgra i ugaonom momentu orbite, a obrnuto proporcionalno trećem stepenu poluprečnika orbite. Polje B_p posledica je relativnog kretanja pozitivno naelektrisanog atomskog jezgra i orbitnog elektrona.

5.3.2 Interakcija spinskog magnetnog momenta i lokalnog magnetnog polja

U odeljku 5.2.3 videli smo da u spoljašnjem magnetnom polju spinski magnetni moment istovremeno precesuje i postavalja se u jednu od dve moguće orijentacije. U lokalnom magnetnom polju, spinski magnetni moment pokazuje iste osobine kao što je to šematski prikazano na Slici 5.3.2. Spinski magnetni moment u lokalnom polju precesuje i orijentiše se „paralelno" ili „antiparalelno" polju.

Energiju interakcije spinskog magnetnog momenta $\vec{\mu}_s$ i lokalnog magnetnog polja $\vec{B}_p$ lako nalazimo uvrštavanjem izraza (5.1.11) u (5.2.15a):

(5.2.15a) $$U = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = -\gamma_s \vec{s} \cdot \vec{B}.$$

Zamenom spoljašnjeg polja $\vec{B}$ lokalnim magnetnim poljem $\vec{B}_p$, nalazimo energiju spinskog magnetnog momenta u lokalnom polju:

$$U_{p,s} = -\gamma_s \vec{s} \cdot \vec{B}_p. \tag{5.3.6a}$$

Ako u ovaj izraz unesemo spinski žiromagnetni odnos iz (5.1.14a) i lokalno magnetno polje iz (5.3.5), konačno dobijamo:

$$U_{p,s} = \frac{1}{2}\left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)\frac{Ze^2}{m^2 r^3}\,\vec{p}_\varphi \cdot \vec{s}. \tag{5.3.6b}$$

Ova jednačina opisuje energiju magnetne interakcije spinskog magnetnog momenta i lokalnog magnetnog polja. Pošto je lokalno magnetno polje proporcionalno orbitnom ugaonom momentu, a spinski magnetni moment proporcionalan spinskom ugaonom momentu, to se ova interakcija ispoljava kao uzajamno delovanje spinskog ugaonog momenta i orbitnog ugaonog momenta, pa se naziva **spin-orbitna interakcija** ili **spin-orbitna sprega**.

Posebno je pogodno da se jednačina (5.3.6b) napiše u obliku u kome je osnovna interakcija lokalnog magnetnog polja i spinskog magnetnog momenta odvojena od uticaja uslova kvantovanja (koji na energiju međudejstva utiču preko kvantnih brojeva n_φ i s):

$$U_{p,s} = a\,\frac{\vec{p}_\varphi \cdot \vec{s}}{\hbar^2}. \tag{5.3.6c}$$

Konstanta a je **konstanta spin-orbitne sprege**. Ona je merilo jačine spin-orbitne interakcije, a brojčano je jednaka energiji spin-orbitne interakcije pri jediničnoj vrednosti odnosa $\vec{p}_\varphi \cdot \vec{s}/\hbar^2$. Upoređivanjem izraza (5.3.6b) i (5.3.6c) nalazimo:

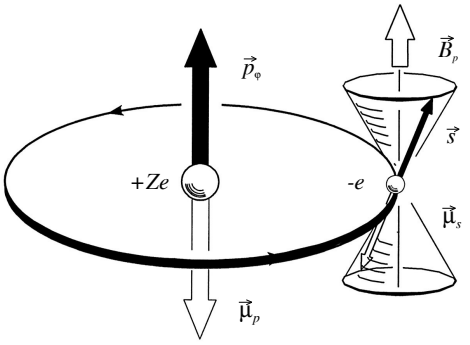
$$a = \frac{1}{2}\left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)\frac{Ze^2\hbar^2}{m^2 r^3}. \tag{5.3.7a}$$

Konstantu a možemo da izrazimo preko električnih veličina zamenom magnetne susceptibilnosti slobodnog prostora (vakuuma) μ_0 električnom ε_0, prema poznatoj (Maksvelovoj) jednačini:

$$\mu_0 = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2}$$

gde je c brzina svetlosti u vakuumu. Tada iz (5.3.7a) dobijamo:

$$a = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2r^3c^2}. \qquad (5.3.7b)$$



Slika 5.3.2 U loklanom magnetnom polju spinski momenti (magnetni i ugaoni) precesuju oko pravca polja; momenti se, takođe, orijentišu. Saglasno pravilima kvantovanja, moguće su dve orijentacije; na slici je prikazana samo „antiparalelna".

Vidimo da konstanta spin-orbitne interakcije, pored univerzalnih konstanti *(e, ħ, m, c,* ε_0*)*, zavisi još i od naelektrisanja jezgra Z i poluprečnika orbite r. Uopšteno gledano, poluprečnik orbite nije stalan, pa je za nalaženje konstante a potrebno da se izračuna **srednja vrednost** izraza $1/r^3$. Očigledno je da izračunavanje ove srednje vrednosti zavisi od izabranog modela i jednostavno je samo za Borov model gde je poluprečnik orbite stalan. Korišćenjem Borovog modela izlažemo se opasnosti da jednačinu (5.3.7b), koja je inače **tačna** za **atome vodonikovog tipa,** učinimo samo približnom. Međutim, jednostavnost izračunavanja u punoj meri nadoknađuje ovaj nedostatak.

Da bismo procenili red veličine konstante spin-orbitne interakcije, kao i njenu zavisnost od naelektrisanja jezgra, glavnog kvantnog broja i sl., izrazićemo je preko drugih atomskih konstanti koristeći Borov model. [Treba da se uoči da i r^3 zavisi od naelektrisanja jezgra, tako da je linearna zavisnost konstante a od rednog broja Z izražena jednačinom (5.3.7b) **samo prividna.**] Dakle, naš cilj je da postojeću kombinaciju univerzalnih konsantni izrazimo preko konstante fine strukture α, energije elektrona u prvoj Borovoj orbiti E_0, poluprečnika prve Borove orbite r_1, itd. Za preobražaj izraza (5.3.7b) potrebne su nam jednačine iz Borovog modela kojima se izražava energija elektrona u atomu sličnom vodoniku, u zavisnosti od glavnog kvantnog broja n i od naelektrisanja jezgra $+Ze$, $E_{n,Z}$:

(4.2.9) $$E_{n,Z} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2r} \qquad (*)$$

(P-4.6.4.1) $$E_{n,Z} = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\frac{Z^2}{n^2} \qquad (**)$$

$$E_{n,Z} = E_0 \frac{Z^2}{n^2} \qquad (***)$$

i poluprečnik odgovarajuće Borove orbite:

(P-4.6.2.1)
$$r_n = \frac{\hbar}{mc} \frac{1}{\alpha} \frac{n^2}{Z}. \qquad (****)$$

Prvo treba uočiti to da izraz (5.3.7b) sadrži u sebi jednačinu (*), pa zamenom dobijamo:

$$a = -E_{n,Z} \frac{\hbar^2}{m^2 c^2 r_n^2} \qquad (5.3.7c)$$

a zamenom r^2_n iz (****) dobija se:

$$a = -E_{n,Z} \alpha^2 \frac{Z^2}{n^4}. \qquad (5.3.7d)$$

Najzad, unošenjem $E_{n,Z}$ iz (***) u izraz (5.3.7d), dobijamo jednačinu kojom se konstanta fine strukture izražava preko drugih atomskih konstanti:

$$a = E_0 \alpha^2 \frac{Z^4}{n^6}. \qquad (5.3.7e)$$

Iz dobijene jednačine možemo da izvučemo tri važna zaključka:

1. Konstanta spin-orbitnog sprezanja, kojom se izražava veličina cepanja energijskog nivoa elektrona usled spin-orbitne interakcije, istog je reda veličine (i iste vrste), kao i Zomerfeldova, jednačina (4.6.44a) i Dirakova relativistička popravka, jednačina (4.6.44c). Sva tri izraza proporcionalna su $E_0\alpha^2Z^4$.

2. Spin-orbitna interakcija proporcionalna je četvrtom stepenu naelektrisanja jezgra. Zbog toga se njen uticaj teško opaža kod atoma vodonika. Iz istog razloga kod alkalnih metala spin-orbitna interakcija naglo raste sa porastom naelektrisanja jezgra, što se ogleda u progresivnom porastu cepanja dubleta od litijuma do cezijuma, kao što je pomenuto u odeljku 4.8;

3. Spin-orbitna interakcija opada sa porastom glavnog kvantnog broja, što se ispoljava u smanjenom cepanju energijskih nivoa za velike vrednosti kvantnog broja *n*, kao što može da se vidi na Slici 4.8.1. U pogledu zavisnosti spin-orbitnog međudejstva od glavnog kvantnog broja, izraz (5.3.7d) je vrlo približan. To je posledica ograničenosti Borovog modela koji ne prepoznaje druge kvantne brojeve osim glavnog kvantnog broja *n*.

Za dobijanje potpune slike o spin-orbitnoj interakciji potrebno je razmotriti i skalarni proizvod $\vec{p}_\varphi \cdot \vec{s}$ iz izraza (5.3.3b), tj. odnose između vektora $\vec{p}_\varphi \cdot \vec{s}$. Pravi oblik ovih zakonitosti ne može se dobiti na osnovu dosadašnjih razmatranja. Naime, odnosi između ovih vektora u velikoj meri zavise od njihove kvantne prirode koju još uvek nismo razmatrali, a koju ćemo detaljno proučiti u sledećem odeljku u vezi sa formulacijom vektorskog modela atoma.

5.4 VEKTORSKI MODEL ATOMA

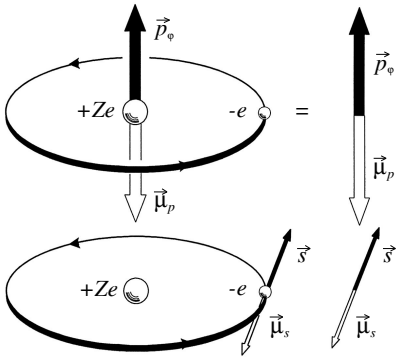
U dosadašnjim razmatranjima videli smo da Borovim i Bor-Zomerfeldovim modelom vrlo uspešno može da se opiše veliki broj pojava u vezi sa građom i osobinama atoma. Ponekad smo zapadali i u teškoće ali je ipak zapanjajući broj pojava koje smo mogli kvantitativno da opišemo, počevši od spektara atoma vodonika i atoma sličnih vodoniku (tačnije jona), pa do orbitnog magnetizma atoma. Ključna osobina ovih poluklasičnih modela jeste da pružaju intuitivnu sliku o građi atoma i o pojavama u vezi sa njom. Pokazalo se, međutim, da baš taj aspekt Borovog i Bor-Zomerfeldovog modela (prikazivanje detaljne intuitivne slike) ponekad predstavlja smetnju za ispravno razumevanje pojava. Na primer, razmatrajući spin-orbitno međudejstvo pomoću Borovog modela, dobili smo jasnu predstavu o poreklu tog međudejstva i o suštini pojave dubletne strukture energijskih nivoa. Po istom modelu bilo je lako zamisliti i precesiju elektrona u lokalnom polju orbitnog momenta, kao što je šematski prikazao na Slici 5.3.2. Međutim, koristeći isti model vrlo je teško zamisliti i razumeti obrnutu situaciju po kojoj spin-orbitna interakcija može da se smatra delovanjem lokalnog polja elektronskog spina na orbitni magnetni moment. Tada orbitni magnetni moment treba da precesuje u spinskom lokalnom magnetnom polju! Ovako, „obrnuto" razmatranje mora biti ispravno, s obzirom na nepromenljivost (invarijantnost) izraza (5.3.3) pri permutaciji orbitnog i spinskog ugaonog momenta. U stvarnosti, kao što ćemo videti u odeljku 5.4.2 i spinski i orbitni momenti, zbog spin-orbitnog međudejstva, jednovremeno precesuju oko njihove rezultante.

Fizička slika o ovoj interakciji, zapravo ekvivalencija spinskih i orbitnih momenata pri njihovom uzajamnom delovanju, bila bi mnogo jasnija kada bismo umesto orbita, atomskog jezgra, rotacije elektrona oko sopstvene ose i ostalih vizuelnih sredstava, model atoma sveli smo na ključne elemente. Dakle, za opis spin-orbitnog međudejstva, dovoljno je da se elektronska orbita predstavi pomoću spregnutih vektora orbitnog ugaonog i orbitnog magnetnog momenta, a elektron pomoću spregnutih vektora spinskog ugaonog i spinskog magnetnog momenta, Slika 5.4.1. Kada je problem sveden na uzajamno delovanje para spregnutih vektora, sasvim je svejedno da li posmatramo uticaj magnetnog polja orbitnog momenta, $\vec{B}_p$, na spinski magnetni moment, $\vec{\mu}_s$, ili dejstvo magnetnog polja spinskog momenta $\vec{B}_s$, na orbitni magnetni moment, $\vec{\mu}_p$. Simetrija je očigledna i, kao što ćemo pokazati u odeljku 5.4.2, nije teško zamisliti precesiju vektora $\vec{p}_\varphi$ i $\vec{s}$ oko rezultujućeg ugaonog momenta.

Normalno, pored spin-orbitnog uzajamnog dejstva postoji i niz drugih pojava koje se mnogo lakše opisuju svođenjem na interakciju reprezentativnih vektora nego intuitivnom slikom nekog od poluklasičnih modela. Tako smo od intuitivne slike o strukturi atoma prešli na formalnu, odnosno od poluklasičnog modela na **vektorski model atoma.**

Osnovna prednost **vektorskog modela** nad poluklasičnim jeste što se u njemu radi sa veličinama koje mogu da se, posredno ili neposredno, mere i što daje vrlo jasnu sliku o njihovim međusobnim odnosima koristeći uobičajeni aparat vektorske algebre. Kod Borovog modela, na primer, često koristimo poluprečnik elektronske orbite, mada je to veličina koja eksperimentalno ne može da se odredi i koja, kao što ćemo kasnije videti, u suštini nema ni fizičkog smisla. Vektorski model pokazao se naročito korisnim u atomskoj spektroskopiji, gde uz njegovu pomoć ogromno mnoštvo eksperimentalnih podataka može da se lako razvrsta i sistematizuje.

Druga prednost vektorskog modela, s obzirom na to da je on lišen stvaranja bilo kakve slike o stvarnim odnosima između elemenata atoma (na primer, da li elektron obilazi jezgro po kružnim ili eliptičkim orbitama), jeste njegova prilagodljivost pravilima i zakonitostima koje nisu jasne i očigledne na prvi pogled. Na primer, kao što je više puta pominjano, orbitni momenti, ugaoni i magnetni, u *s*-orbiti moraju da budu jednaki nuli da bi se objasnila dubletna struktura spektara alkalnih metala. Takav (eksperimentalni!) nalaz potpuno protivreči poluklasičnim modelima. Međutim, vektorski model se uopšte ne bavi poreklom orbitnih momenata i činjenica da u nekim stanjima neki vektori imaju intenzitet jednak nuli uopšte ne remeti unutrašnji sklad modela.



Slika 5.4.1 Vektorski model atoma: prikaz atoma svodi se na zamenu svih njegovih elemenata odgovarajućim vektorima. Na primer, kruženje naelektrisanja i mase elektrona oko jezgra predstavlja se, umesto orbitama, vektorima orbitnog ugaonog i orbitnog magnetnog momenta. Na isti način elektronski spin predstavlja se spregnutim vektorima spinskog ugaonog i spinskog magnetnog momenta.

Zbog toga je vektorski model zgodan za uvođenje nekih pravila koja ne mogu da se razumeju intuitivno, a koja proističu iz kvantne teorije. Matematički i fizički postupci iz kojih proističu ta pravila mogu da budu vrlo složeni i prevazilaze obim i svrhu ove knjige. Međutim, njihovo *ad hoc* uvođenje pruža mogućnost za kvantitativno opisivanje novih pojava i za ponovno tumačenje nekih pojava koje su razmatrane u okviru poluklasičnih modela, a koje su, s obzirom na ograničenja modela, izvedene samo kvalitativno. Na primer, kod spin-orbitnog međudejstva član $\vec{p}_\varphi \cdot \vec{s}$ u izrazima (5.3.3) razmotren u okviru poluklasične slike, daje rezultate koji se razlikuju od eksperimentalnih nalaza na vrlo očigledan način. Međutim, pomoću pravila za slaganje momenata, koja ćemo definisati u sledećem odeljku, može da se kvantitativno predvidi ishod eksperimenata u kojima spin-orbitna interakcija ima značajnu ulogu.

5.4.1 Elementi vektorskog modela: vektori ugaonog i magnetnog momenta

U ovom odeljku opisaćemo osnovne osobine vektora ugaonog i magnetnog momenta koje su izvedene iz kvantne teorije. Mnoge od osobina intuitivno su jasne jer potiču iz vektorske algebre. Osobine koje nisu jasne (kvantovanje momenata i projektovanje momenata na izabrani pravac) ne mogu da se objasne pomoćnom slikom izvedenom iz makrosveta. Pravu predstavu o tim osobinama steći ćemo u okviru Šredingerovog modela atoma, 9. poglavlje, i Hajzenbergove relacije neodređenosti, odeljak 8.3.

Osnovni elementi vektorskog modela atoma su vektori ugaonih momenata, orbitni i spinski i odgovarajući vektori magnetnih momenata (takođe orbitni i spinski).

Zbog opšte prirode veze između ugaonog i njemu pridruženog magnetnog momenta, koja je izražena jednačinama (5.1.7) i (5.1.12), magnetni vektori mogu da se izraze preko ugaonih i, vrlo često, i ne pominju se izričito. To smo mogli da vidimo kod spin-orbitne interakcije, koja je po fizičkoj suštini **magnetna**, a koja se u konačnom obliku izražava kao interakcija spinskog i orbitnog **ugaonog** momenta.

Orbitni ugaoni moment $\vec{l}$

Orbitni ugaoni moment $\vec{l}$ odgovara orbitnom ugaonom momentu $\vec{p}_\varphi$ koji smo odredili u Bor-Zomerfleldovoj teoriji. To znači da u svim do sada izvedenim jednačinama vektor $\vec{p}_\varphi$ može da se zameni vektorom $\vec{l}$. Međutim, mala ali značajna razlika javlja se kod njihovog kvantovnja, što je i glavni razlog za uvođenje novog simbola $\vec{l}$. Dakle, orbitni ugaoni moment kvantuje se orbitnim kvantnim brojem *l:*

$$\vec{l} = \sqrt{l(l+1)}\ \hbar\vec{l}^{\circ} \tag{5.4.1a}$$

$\vec{l}^{\circ}$ je jedinični vektor čijim je smerom određen smer vektora ugaonog momenta. Isti izraz u skalarnom obliku je:

$$|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \tag{5.4.1b}$$

$$|\vec{l}|^2 = l(l+1)\hbar^2 \tag{5.4.1c}$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots n-1$$

Kao i ranije, *n* je glavni kvantni broj.

Projekcija orbitnog ugaonog momenta na proizvoljno izabranu osu (recimo, *z*-osu) l_z, kvantuje se na isti način kao i $p_{\varphi,z}$, jednačina (4.6.50):

$$l_z = m_l\hbar \tag{5.4.2a}$$

$$m_l = -l, (-l+1), \ldots -1, 0, +1, \ldots l-1, l. \tag{5.4.2b}$$

Magnetni (orbitni) kvantni broj m_l dobio je ovde u indeksu *l*, da bi se naznačilo da se odnosi na orbitne momente. Isti je kao i odgovarajući kvantni broj u Bor-Zomerfeldovoj teoriji.

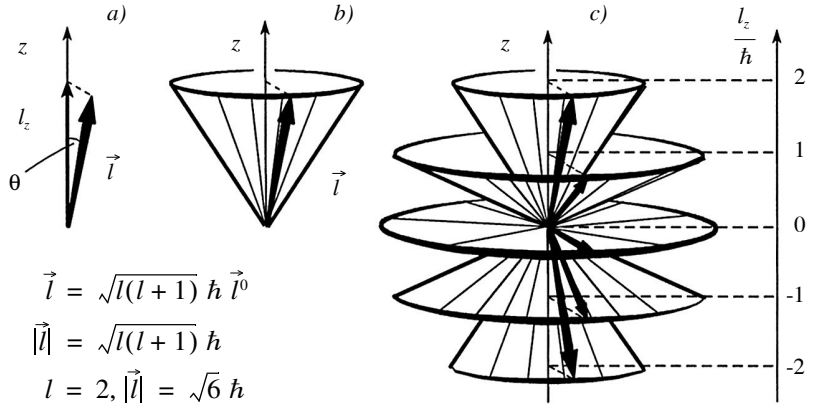
Važna osobina svih ugaonih momenata u vezi sa prostornim kvantovanjem posledica je Hajzenbergove relacije neodređenosti, odeljak 8.3: **Ukoliko je projekcija vektora ugaonog momenta na proizvoljno izabran pravac poznata, tada, u principu, ne može da bude poznata njegova projekcija na neki drugi pravac.** Drugim rečima, ne može da bude poznata (merljiva!) projekcija vektora ugaonog momenta na dva pravca jednovremeno. Ova osobina ima izvanredno veliki značaj i prodire duboko u kvantnu prirodu atomskih objekata. U okviru vektorskog modela lako se daje njeno geometrijsko tumačenje.

Odnos projekcije vektora i njegovog intenziteta nalazimo iz jednačina (5.4.1a) i (5.4.2a):

$$\cos\theta = \frac{l_z}{|\vec{l}|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}\cdot \tag{5.4.3}$$

Vidimo da je za navedene kvantne brojeve (tj., za posmatrano stanje) taj odnos stalan, što znači da je i ugao θ koji vektor $\vec{l}$ zaklapa sa izabranom osom stalan. Nemogućnost merenja projekcije u drugim pravcima, kada je poznata jedna projekcija, ukazuje na to da ugao koji vektor momenta zaklapa sa bilo kojim drugim pravcem nije određen. Geometrijski, to znači da se vektor $\vec{l}$ nalazi negde na površini kupe koja je opisana oko odabranog pravca duž kojeg je projekcija poznata, Slika 5.4.2b. To što je vektor na površini kupe ne znači da vektor precesuje, već samo da je to način da se najbliže odredi njegov pravac u prostoru. Do precesije oko odabranog pravca dolazi tek kada se vektor nađe u magnetnom polju. Iz jednačine (5.2.5) očigledno je da je u odsustvu magnetnog polja precesiona frekvencija jednaka nuli. **Bez magnetnog polja nema precesije.** Prema tome, za određenu vrednost kvantnog broja m_l vektor ugaonog momenta nalazi se negde na površini kupe koja je određena proizvoljno izabranom osom duž koje tražimo projekciju i veličinom same projekcije, koja je izražena jednačinom (5.4.2a).

Ranije smo videli, a iz jednačine (5.4.2b) to je očigledno, da kvantno stanje određeno orbitnim kvantnim brojem l može da se ostvari na $(2l+1)$ načina. Pošto su u odsustvu polja sva ta stanja degenerisana, tj. u odsustvu magnetnog polja sva imaju istu energiju, vektor ugaonog momenta $\vec{l}$ može da ima $(2l+1)$ različitih projekcija. U svakoj od njih on je lokalizovan na površini odgovarajuće kupe. Pošto su energije različitih stanja koja odgovaraju različitim kupama **u odsustvu magnetnog polja međusobno jednake,** to vektor ugaonog momenta ravnopravno i podjednako verovatno može da se nađe na površini svake od tih kupa. Zato celokupan prostor u kojem može da se nađe vektor ugaonog momenta, u odsustvu magnetnog polja, predstavlja skup površina $(2l+1)$ kupa, kao što je prikazano na Slici 5.4.2c.



Slika 5.4.2 Orbitni ugaoni moment $\vec{l}$ i njegovo prostorno kvantovanje: a) orbitni ugaoni moment predstavljamo vektorom čiji intenzitet zavisi od orbitnog kvantnog broja (5.4.1a). U odsustvu spoljašnjeg polja možemo da izaberemo proizvoljni pravac, recimo pod uglom θ u odnosu na vektor momenta, duž kojeg moment ima projekciju koja je izražena jednačinom (5.4.2a); b) pošto vektor ugaonog momenta može da ima projekciju određenu samo duž jednog pravca, to se u stanju određenom kvantnim brojem m on nalazi na površini kupe čija se osa poklapa sa odabranim pravcem (ovde označenim kao z-osa). Ugao kupe zavisi od kvantnih brojeva prema izazu (5.4.3); c) za kvantni broj l postoji $(2l+1)$ stanja sa različitim kvantim brojem m. Pošto su, u odsustvu polja energije tih stanja jednake, dakle, stanja su degenerisana, vektor ugaonog momenta sa podjednakom verovatnoćom može da se nađe na površini bilo koje kupe. U odsustvu polja ugaoni moment ne precesuje!

Sa Slike [i iz jednačine (5.4.3)] se, takođe, vidi da je projekcija vektora na odabranu osu uvek manja od njegovog intenziteta $l_z < |\vec{l}|$. To znači da vektor ugaonog momenta **ne može** da bude paralelan sa osom na koju se projektuje. Za vektor u magnetnom polju [tada vektor projektujemo na pravac polja jer je energija u polju određena upravo tom projekcijom, jednačinom (5.2.11b)], zaključujemo da ne može da bude paralelan polju, što je jedan od bitnih uslova za objašnjenje precesije.

Spinski ugaoni moment $\vec{s}$

Spinski ugaoni moment $\vec{s}$ ima iste opšte osobine kao i orbitni ugaoni moment $\vec{l}$, s tom razlikom što je kvantovan spinskim kvantnim brojem s koji ima stalnu vrednost ½:

$$\vec{s} = \sqrt{s(s+1)}\hbar\vec{s}^{\circ} \tag{5.4.4a}$$

$\vec{s}^{0}$ je jedinični vektor čiji smer određuje smer vektora ugaonog momenta. U skalarnom obliku:

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar \tag{5.4.4b}$$

$$|\vec{s}|^2 = s(s+1)\hbar^2 \tag{5.4.4c}$$

$$s = \frac{1}{2}. \tag{5.4.4d}$$

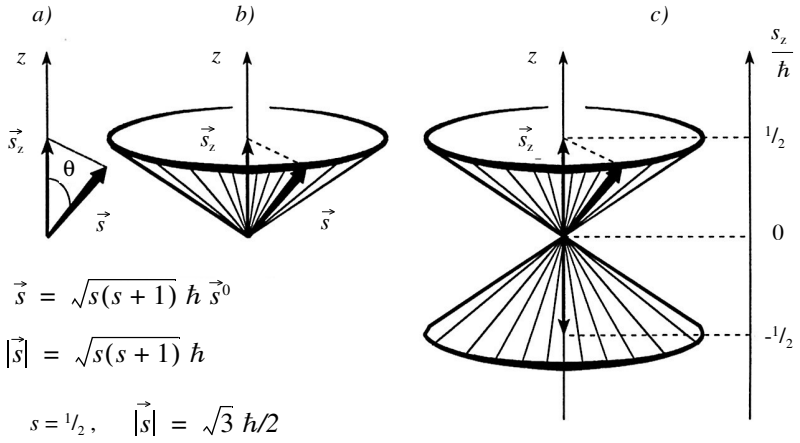
I prostorno kvantovanje spinskog ugaonog momenta može da se opiše na isti način kao i kod orbitnog momenta, s tim što je broj mogućih stanja ograničen veličinom spinskog kvantnog broja:

(5.2.13a) $$s_z = m_s\hbar \tag{5.4.5a}$$

(5.2.13b) $$m_s = -\frac{1}{2},\ +\frac{1}{2}. \tag{5.4.5b}$$

Saglasno ranije pomenutom pravilu (odeljak 4.8), stanja sa različitim vrednostima kvantnog broja m_s mogu da se ostvare na $2s+1$ načina. Za $s = ½$ dobijamo da su moguća samo dva **stanja**. Isti zaključak, očigledno, sledi iz izraza (5.4.5b). U odsustvu magnetnog polja ova stanja imaju iste energije, dakle, dvostruko su degenerisana.

Relativni odnosi između različitih stanja i projekcija spinskog ugaonog momenta prikazani su na Slici 5.4.3. Svi detalji izneti u vezi s orbitnim ugaonim momentom odnose se i na spinski ugaoni moment, imajući u vidu razlike u veličinama kvantnih brojeva. Zapravo, razmatranja izneta u vezi s orbitnim ugaonim momentom odnose se na svaki ugaoni moment (ukupni ugaoni moment, nuklearni ugaoni moment, itd.) uzimajući u obzir razlike u veličini i rasponu odgovarajućih kvantnih brojeva. To predstavlja jednu od važnih, ranije pomenutih, osobina vektorskog modela: određena fizička veličina predstavlja se reprezentativnim vektorom. Bez obzira na poreklo, vektori određene fizičke veličine imaju iste opšte osobine.



Slika 5.4.3 Spinski ugaoni moment $\vec{s}$ i njegovo prostorno kvantovanje: a) spinski ugaoni moment predstavljamo vektorom čiji intenzitet zavisi od spinskog kvantnog broja (5.4.4a). U odsustvu spoljašnjeg polja možemo da izaberemo proizvoljni pravac, recimo pod uglom θ u odnosu na vektor momenta, duž kojeg moment ima projekciju koja je izražena jednačinom (5.4.5a); b) vektor ugaonog momenta može da ima projekciju određenu samo duž jednog pravca. Zato se u stanju određenom kvantnim brojem m_s on nalazi na površini kupe koja je opisana oko odabranog pravca (ovde *z*-osa); c) pošto je $m_s = \pm$ ½ postoje samo dva moguća stanja čije su energije, u odsustvu magnetnog polja, jednake. Dakle, stanja su degenerisana i vektor spinskog ugaonog momenta može sa podjednakom verovatnoćom da se nađe na površini bilo koje kupe. U odsustvu polja spinski ugaoni moment ne precesuje!

Orbitni magnetni moment $\vec{\mu}_l$

Mala promena u kvantovanju orbitnog ugaonog momenta pri prelasku od poluklasičnog momenta $\vec{p}_\varphi$ na kvantnomehanički $\vec{l}$, na sličan način preobražava poluklasični magnetni moment $\vec{\mu}_p$ u kvantnomehanički $\vec{\mu}_l$. Svi odnosi u vezi s orbitnim magnetnim momentom izraženi vektorski, u poluklasičnom modelu, u potpunosti su zadržani i u kvantnomehaničkoj slici. Iz originalne definicije uzajamnog odnosa orbitnog magnetnog i orbitnog ugaonog momenta, jednačina (5.1.10a) dobijamo:

$$\vec{\mu}_l = -\mu_B \frac{\vec{l}}{\hbar}. \tag{5.4.6a}$$

Da bi se očuvala sličnost orbitnog sa spinskim (i ukupnim) magnetnim momentom, ova jednačina se piše i u sledećem obliku:

$$\vec{\mu}_l = -g_l \mu_B \frac{\vec{l}}{\hbar} \tag{5.4.6b}$$

pri čemu je očigledno:

$$g_l = 1. \tag{5.4.6c}$$

Zamenom vektora $\vec{l}$ iz (5.4.1a), nalazimo:

$$\vec{\mu}_l = -g_l \mu_B \sqrt{l(l+1)}\vec{l}^{\,0} . \tag{5.4.6d}$$

$\vec{l}^{\,0}$ je jedinični vektor u smeru orbitnog ugaonog momenta. Znak '-' pokazuje da su vektori $\vec{l}$ i $\vec{\mu}_l$ antiparalelni. U skalarnom obliku je:

$$|\vec{\mu}_l| = + g_l \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad . \tag{5.4.6e}$$

Projekciju mangnetnog momenta na proizvoljnu osu nalazimo kao i ranije. Iz jednačine (5.2.10) sledi da je:

$$\mu_{l,z} = -m_l \mu_B . \tag{5.4.7}$$

Mada je izraz (5.2.10) izveden za magnetni moment u magnetnom polju, uklanjanje polja ne menja uslove kvantovanja već menja samo energiju stanja i precesionu frekvenciju. Van polja, stanja sa različitim kvantnim brojevima m_l su degenerisana. Van polja nema precesije.

Iz izraza (5.4.6a) očigledno je da se $\vec{\mu}_l$ razlikuje od $\vec{l}$ samo za skalarnu konstantu, što znači da **u odsustvu magnetnog polja** vektor $\vec{\mu}_l$ ima sve osobine kao i vektor $\vec{l}$. To se odnosi kako na kvantovanje tako i na projektovanje, degeneraciju stanja, itd. Suštinska razlika između vektora $\vec{\mu}_l$ i $\vec{l}$ javlja se tek pri pojavi magnetnog polja. Magnetno polje deluje na orbitni ugaoni moment **samo preko njemu pridruženog** magnetnog momenta. Međutim, i tada, zbog neraskidive veze između ugaonog i magnetnog momenta, koja je izražena jednačinom (5.4.6a), formalna jednakost ostaje potpuno očuvana.

Spinski magnetni moment $\vec{\mu}_s$

U odeljku 5.1.2 videli smo da između spinskog, magnetnog i spinskog ugaonog momenta, postoji odnos:

(5.1.14b) $$\vec{\mu}_s = -g_s \mu_B \frac{\vec{s}}{\hbar} \tag{5.4.8a}$$

gde je g_s elektronski g-faktor, a μ_B Borov magnetom. Zamenom spinskog ugaonog momenta iz (5.4.4a), dobijamo:

$$\vec{\mu}_s = -g_s \mu_B \sqrt{s(s+1)}\vec{s}^{\,0} \tag{5.4.8b}$$

ili u skalarnom obliku:

$$|\vec{\mu}_s| = -g_s \mu_B \sqrt{s(s+1)} . \tag{5.4.8c}$$

Projekcija spinskog magnetnog momenta na pravac delovanja polja, koju smo našli u odeljku 5.2.3, ista je kao i projekcija na proizvoljno izabrani pravac:

(5.2.14b) $$\mu_{s,z} = -g_s m_s \mu_B . \tag{5.4.9}$$

Odnos između spinskih momenata isti je kao i između orbitnih momenata, pa sve osobine spinskog magnetnog momenta mogu da se dobiju na isti način kao i kod orbitnog magnetnog momenta.

5.4.2 Mehanizam sprezanja momenta

Pitanje međudejstva ugaonih i magnetnih momenata predstavlja ključni problem vektorskog modela atoma. Kao što smo videli u prethodnom odeljku, gledano po fizičkoj suštini, postoje dve vrste momenata – ugaoni (spinski i orbitni) i magnetni (opet spinski i orbitni). Ugaoni (mehanički) momenti, osim veoma slabog gravitacionog polja koje potiče od mase koja je pridružena momentu, nemaju drugu mogućnost za međudejstva sa okolinom. Drugim rečima, ne postoji mehanizam za neposrednu interakciju ugaonih momenata sa okolinom i sa drugim momentima.

S druge strane, oko svakog magnetnog dipola (magnetnog momenta) postoji magnetno polje koje može da deluje na druge magnetne momente. Ovo delovanje detaljno smo razmatrali u okviru spin-orbitnog međudejstva, odeljak 5.3. Pošto je svakom magnetnom pridružen i odgovarajući ugaoni moment, to se neposredno međudejstvo magnetnih momenata prenosi i na ugaone momente. Magnetno dipol-dipol međudejstvo, koje je detaljno izloženo u odeljku 5.3, ovde će biti svedeno na formalnu sliku koja odgovara potrebama vektorskog modela.

Posmatrajmo jednoelektronski atom (atom sličan vodoniku) čiji se elektron nalazi u orbiti koja ima ugaoni moment $l > 0$. Međusobno delovanje magnetnih momenata, spinskog i orbitnog, može da se shvati kao međudejstvo spinskog magnetnog momenta i orbitnog magnetnog polja ili kao međudejstvo orbitnog magnetnog momenta i spinskog magnetnog polja.

Međudejstvo spinskog magnetnog momenta $\vec{\mu}_s$ i lokalnog magnetnog polja $\vec{B}_l$ (koje potiče od orbitnog kretanja elektrona) iste je vrste kao i međudejstvo sa spoljašnjim magnetnim poljem koje smo razmatrali u odeljku 5.2. Jednačina kretanja, po ugledu na izraz (5.2.2), je:

$$\frac{d\vec{s}}{dt} = \gamma_s \vec{s} \times \vec{B}_l . \tag{5.4.10}$$

Isto tako, međudejstvo orbitnog magnetnog momenta $\vec{\mu}_l$ i lokalnog magnetnog polja $\vec{B}_s$ (koje potiče od spinskog magnetnog momenta) izražava se odgovarajućom jednačinom kretanja:

$$\frac{d\vec{l}}{dt} = \gamma_l \vec{l} \times \vec{B}_s . \tag{5.4.11}$$

Jednačine (5.4.10) i (5.4.11) ne mogu tako jednostavno da se integrale kao (5.2.2) jer magnetna polja koja se pojavljuju u njima $\vec{B}_l$ i $\vec{B}_s$ **nisu stalna**. Magnetna polja su promenljiva jer slede odgovarajuće magnetne momente koji su u pokretu, a čije kretanje upravo izražavaju jednačine (5.4.10) i (5.4.11).

Lokalno magnetno polje, pored veličine momenta od kojeg potiče, zavisi i od lokalne geometrije, dakle, od uzajamnog položaja tačke u kojoj se polje meri i magnetnog dipola koji je izvor polja:

$$\vec{B}_l = k_l(x_s, y_s, z_s)\vec{\mu}_l . \tag{5.4.12a}$$

Indeks l kod funkcije k označava njenu zavisnost od momenta koji je izvor polja, a indeks s u koordinatama pokazuje to da se koordinate traže na položaju momenta na koji polje deluje. Magnetni moment iz poslednje jednačine može pomoću odnosa (5.1.7) da se izrazi preko orbitnog ugaonog momenta:

$$\vec{B}_l = k_l(x_s, y_s, z_s)\gamma_l\vec{l} . \tag{5.4.12b}$$

Isto važi i za lokalno magnetno polje spinskog magnetnog momenta:

$$\vec{B}_s = k_s(x_l, y_l, z_l)\vec{\mu}_s \tag{5.4.13a}$$

i s obzirom na vezu između spinskog magnetnog i ugaonog momenta:

(5.1.12)
$$\vec{B}_s = k_s(x_l, y_l, z_l)\gamma_s\vec{s} . \tag{5.4.13b}$$

Funkcija k ne menja vrednost kada indeksi s i l zamene svoja mesta. Ovo je razumljivo jer se spinski i orbitni magnetni momenti pri njihovom uzajamnom delovanju ponašaju na isti način, a njihovi uzajamni položaji su simetrični. Drugim rečima, energija međudejstva orbitnog magnetnog polja $\vec{B}_l$ i spinskog magnetnog momenta $\vec{\mu}_s$, ista je kao i energija međudejstva spinskog magnetnog polja $\vec{B}_s$ i orbitnog magnetnog momentu $\vec{\mu}_l$:

$$-\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l = -\vec{\mu}_l \cdot \vec{B}_s$$

odakle sledi:

$$k_l(x_s, y_s, z_s) = k_s(x_l, y_l, z_l) = K .$$

Uzmemo li u obzir poslednji uslov, zamenom izraza za lokalna polja $\vec{B}_l$ iz (5.4.12b) i $\vec{B}_s$ iz (5.4.13b) u odgovarajuće jednačine kretanja (5.4.10) i (5.4.11) dobijamo:

$$\frac{d\vec{s}}{dt} = \gamma_s\gamma_l K\vec{s}\times\vec{l} \tag{5.4.14a}$$

i:

$$\frac{d\vec{l}}{dt} = \gamma_s\gamma_l K\vec{l}\times\vec{s}. \tag{5.4.14b}$$

Jednačine (5.4.14) formalno pokazuju da su ugaoni orbitni i ugaoni spinski moment uzajamno spregnuti. Činjenica da je sprezanje **magnetne** prirode ogleda se u zavisnosti od žiromagnetnih odnosa. Rešenje sistema diferencijalnih jednačina (5.4.14) može da se dobije i bez integraljenja, jednostavnim transformacijama. Sabiranjem izraza (5.4.14a) i (5.4.14b) dobijamo:

$$\frac{d\vec{s}}{dt} + \frac{d\vec{l}}{dt} = \gamma_s\gamma_l K(\vec{s}\times\vec{l} + \vec{l}\times\vec{s})$$

odnosno:

$$\frac{d(\vec{s}+\vec{l})}{dt} = \gamma_s\gamma_l K(\vec{s}\times\vec{l} - \vec{s}\times\vec{l}).$$

Dakle, nalazimo da je:

$$\frac{d(\vec{s}+\vec{l})}{dt} = 0 \tag{5.4.15}$$

odakle je, očigledno:

$$\vec{l} + \vec{s} = const. \tag{5.4.16a}$$

Iz dobijenog izraza vidimo da, mada su vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ u kretanju, njihov zbir ostaje stalan. Drugim rečima, **kada su vektori orbitnog i spinskog momenta spregnuti, njihov zbir je konstanta kretanja.** Zbir ugaonih momenata naziva se ukupni ugaoni moment $\vec{j}$:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}. \tag{5.4.16b}$$

Normalno, ukupni ugaoni moment može da se odredi u svakoj prilici, ali, konstanta kretanja je samo kada su vektori spregnuti.

Pošto se, saglasno jednačini (5.4.16b), zbir ugaonih momenata tokom vremena ne menja, to znači da se obe komponente $\vec{l}$ i $\vec{s}$ kreću usaglašeno i to tako da njihov međusobni ugao tokom vremena ostaje stalan. Zbog toga je za bliže određivanje prirode njihovog kretanja, dovoljno da se razmotri kretanje samo jedne komponente.

Jednačinu kretanja spinskog ugaonog momenta, izraz (5.4.14a), ne možemo da integralimo prema postupku iz odeljka D-2.2.4 zbog toga što vektor $\vec{l}$ nije stalan. Međutim, ako se prisetimo da je vektorski proizvod paralelnih vektora jednak nuli,

$\vec{s} \times \vec{s} = 0$, desnu stranu vektorskog proizvoda u (5.4.14a) možemo da proširimo sa $\vec{s}$, pa dobijamo:

$$\frac{d\vec{s}}{dt} = \gamma_s \gamma_l K \vec{s} \times (\vec{l} + \vec{s}) \tag{5.4.17a}$$

a s obzirom na izraz (5.4.16b):

$$\frac{d\vec{s}}{dt} = \gamma_s \gamma_l K \vec{s} \times \vec{j}\,. \tag{5.4.17b}$$

Vektor ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$ ne menja se tokom vremena, jednačine (5.4.16), pa dobijeni izraz (5.4.17b) može da se integrali prema postupku koji je iznet u D-2.2.4. I bez traženja rešenja, iz oblika jednačine (5.4.17b) zaključujemo da vektor $\vec{s}$ precesuje oko vektora $\vec{j}$. S obzirom na to da je $\vec{s}$ komponenta vektora $\vec{j}$ (koji je stalan), zaključujemo da i druga komponenta, vektor $\vec{l}$, takođe precesuje oko vektora $\vec{j}$ i to istom precesionom frekvencijom.

Dakle, usled spin-orbitnog međudejstva, koje je po svojoj fizičkoj suštini **magnetno,** vektori orbitnog i spinskog ugaonog momenta $\vec{l}$ i $\vec{s}$, precesuju oko svog vektorskog zbira $\vec{j}$, koji predstavlja ukupni ugaoni moment sistema i koji je konstanta kretanja spregnutih vektora.

5.4.3 Ukupni ugaoni moment

Ukupni ugaoni moment za koji smo u prethodnom odeljku videli da predstavlja konstantu kretanja **spregnutih** vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$, kvantuje se kao i svaki drugi ugaoni moment odgovarajućim kvantnim brojem. Opšta pravila za orbitni i za spinski ugaoni moment izneta u odeljku 5.4.1, važe i za ukupni ugaoni moment uz odgovarajuće izmene i dopune.

Dakle, ukupni ugaoni moment je vektorski zbir orbitnog $\vec{l}$ i spinskog $\vec{s}$ ugaonog momenta:

(5.4.16b) $$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \tag{5.4.18}$$

i kvantuje se unutrašnjim kvantnim brojem (ili kvantnim brojem ukupnog ugaonog momenta) *j*:

$$\vec{j} = \sqrt{j(j+1)}\hbar \vec{j}^{\,0}. \tag{5.4.19a}$$

$\vec{j}^{\,0}$ je jedinični vektor čiji smer određuje smer vektora ugaonog momenta. Isti izraz u sklalarnom obliku je:

$$|\vec{j}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar \tag{5.4.19b}$$

$$|\vec{j}|^2 = j(j+1)\hbar^2. \tag{5.4.19c}$$

Opseg vrednosti koje može da ima unutrašnji kvantni broj određen je Klebš-Gordanovom (Clebsh-Gordan) serijom:

$$j = l+s, l+s-1, \ldots, |l-s|+1, |l-s|. \tag{5.4.20a}$$

Uslov (5.4.20a) koji sledi iz kvantnomehaničkog razmatranja problema, koristićemo kao gotovo pravilo ne upuštajući se u njegovo objašnjavanje.

S obzirom na to da kod jednoelektronskog sistema (koji ovde razmatramo) kvantni broj s ima stalnu vrednost, s = ½, izraz (5.4.20a) može da se napiše u jednostavnijem obliku:

$$j = l \pm \frac{1}{2} \qquad \text{za} \qquad l > 0 \tag{5.4.20b}$$

i:

$$j = +\frac{1}{2} \qquad \text{za} \qquad l = 0. \tag{5.4.20c}$$

Prostorno kvantovanje ukupnog ugaonog momenta izražava se na isti način kao i kvantovanje orbitnog ili spinskog momenta impulsa:

$$j_z = m_j\hbar \tag{5.4.21a}$$

$$m_j = -j, -j+1, \ldots, j-1, j\,. \tag{5.4.21b}$$

Ovde je m_j magnetni kvantni broj ukupnog mometna impulsa. Kao i ranije, vektor $\vec{j}$ nalazi se negde na kupi čija je ivica $\sqrt{j(j+1)}\hbar$, a visina $m_j\hbar$. Isto tako, iz jednačine (5.4.21b) sledi da za dati kvantni broj, j, postoji ukupno $2j + 1$ stanja sa različitim vrednostima kvantnog broja m_j. Dakle, bez spoljašnjeg polja, stanja koja su određena kvantnim brojem j su $(2j + 1)$-put degenerisana. Magnetno polje uklanja degeneraciju i stanja se cepaju na $2j + 1$ komponenata koje imaju međusobno različite energije, što ćemo detaljnije razmotriti u sledećem odeljku.

Svi odnosi izraženi jednačinama od (5.4.18) do (5.4.21) proizlaze iz kvantnomehaničke slike. Vektorski model, međutim, u velikoj meri olakšava njihovo prikazivanje kao i uzajamne odnose između njih. Na Slici 5.4.4 prikazano je slaganje vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$, pri stvaranju ukupnog ugaonog momenta. Slaganje je malo složenije nego što to na prvi pogled izgleda jer istovremeno treba da se zadovolji nekoliko uslova. Veza između vektora $\vec{l}$, $\vec{s}$ i $\vec{j}$ je linearna, jednačina (5.4.18), kao i veza između njihovih kvantnih brojeva, izraz (5.4.20). Međutim, veza između intenziteta vektora je **nelinearna**:

$$\sqrt{l(l+1)} + \sqrt{s(s+1)} \neq \sqrt{j(j+1)}\,. \tag{5.4.22}$$

Ova nelinearnost predstavlja ključni uslov za vektorsko sabiranje momenata iz kojeg sledi da se vektor $\vec{l}$, $\vec{s}$ i $\vec{j}$ sabiraju samo pod određenim uglovima i da pri tome, kao što je prikazano na Slici 5.4.4b, **ne mogu da budu paralelni.** Dozvoljene uglove za slaganje vektora lako nalazimo kvadriranjem izraza (5.4.18):

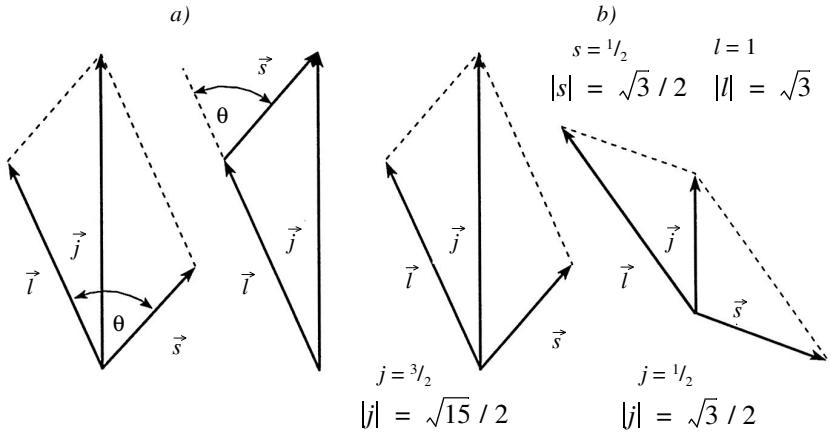
$$\vec{j} \cdot \vec{j} = (\vec{l} + \vec{s}) \cdot (\vec{l} + \vec{s})$$

$$\vec{j} \cdot \vec{j} = \vec{l} \cdot \vec{l} + \vec{s} \cdot \vec{s} + 2\vec{l} \cdot \vec{s}$$

$$|\vec{j}|^2 = |\vec{l}|^2 + |\vec{s}|^2 + 2|\vec{l}| \cdot |\vec{s}| \cos(\vec{l} \cdot \vec{s})$$

odakle dobijamo:

$$\cos(\vec{l} \cdot \vec{s}) = \frac{|\vec{j}|^2 - |\vec{l}|^2 - |\vec{s}|^2}{2|\vec{l}| \cdot |\vec{s}|}. \qquad (5.4.23)$$



Slika 5.4.4 Ukupni ugaoni moment $\vec{j}$ vektorski je zbir orbitnog $\vec{l}$ i spinskog $\vec{s}$ momenta impulsa (ugaonog momenta): a) vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ sabiraju se po pravilu trougla ili po pravilu paralelograma, obrazujući kao razultantu ukupni ugaoni moment $\vec{j}$; b) slaganjem orbitnog i spinskog momenta impulsa, za $l = 1$ i $s = {}^1/_2$ dobijaju se dva vektora ukupnog ugaonog momenta sa $j = 3/2$ i $j = {}^1/_2$.

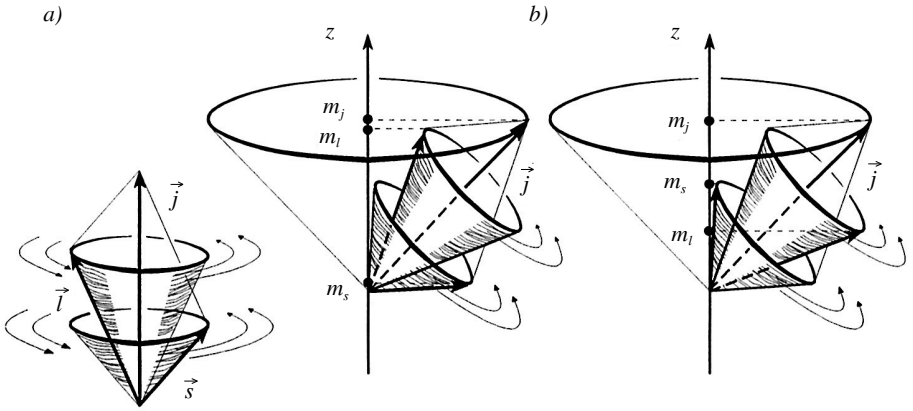
Zamenom modula i kvadrata vektora iz odgovarajućih izraza [(5.4.1b,c), (5.4.4b,c) i (5.4.19c)] dobijamo:

$$\cos(\vec{l} \cdot \vec{s}) = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{l(l+1)}\sqrt{s(s+1)}} \qquad (5.4.23a)$$

odakle neposredno sledi da je ugao pod kojim se vektori slažu jednoznačna funkcija kvantnih brojeva *j*, *l* i *s*. S obzirom na to da za jednoelektronski sistem kvantni broj *j* može da ima samo dve vrednosti, jednačine (5.4.20b,c), za svako *l* moguća su samo dva ugla θ, Slika 5.4.4b.

Slika 5.4.4 pruža nam uvid samo u onaj deo uzajamnih geometrijskih odnosa između vektora $\vec{l}$, $\vec{s}$ i $\vec{j}$, koji su algebarski izraženi jednačinama (5.4.23). Međutim, iz izraza (5.4.17) sledi da vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ precesuju oko vektora $\vec{j}$. Precesija uopšte nije bitna za izražavanje njihovog sabiranja. Međutim, precesija je ključna za opisivanje kvantovanja ukupnog ugaonog momenta i za uspostavljanje odnosa između magnetnih kvantnih brojeva m_l, m_s i m_j.

Na Slici 5.4.5 prikazana je celokupna šema slaganja **spregnutih** vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$ u ukupni ugaoni moment $\vec{j}$. Pored toga što se slažu samo pod posebnim uglovima, jednačine (5.4.23), vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ precesuju oko vektora $\vec{j}$. Precesija se odvija i **bez spoljašnjeg polja** i posledica je **sprezanja** vektora, odnosno uzajamnog delovanja **magnetnih** komponenti kako je već opisano u odeljku 5.4.2.



Slika 5.4.5 Sistem **spregnutih** vektora $\vec{l}$, $\vec{s}$ i $\vec{j}$: a) u odsustvu polja vektori orbitnog i spinskog ugaonog momenta $\vec{l}$ i $\vec{s}$ precesuju oko vektora ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$; b) vektor $\vec{j}$ može da ima određenu projekciju samo duž jednog, proizvoljno izabranog, pravca. Pošto u drugim pravcima ne može da ima određenu projekciju, vektor $\vec{j}$ se nalazi negde na površini kupe koja je opisana oko pravca na kojem se traži projekcija. Bez spoljašnjeg polja vektor $\vec{j}$ **ne** precesuje oko izabranog pravca (zbog pogodnosti kao pravac projektovanja najčešće se bira *z*-osa). Međutim, i tada vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ precesuju oko vektora $\vec{j}$. Pošto se osa njihove precesije ne poklapa sa osom projektovanja, *z*-osom, vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ ne mogu da imaju stalne projekcije na *z*-osu. Zbog toga se m_l i m_s tokom vremena menjaju, tj., nisu određeni.

U pogledu kvantovanja projekcije u proizvoljno izabranom pravcu, vektor $\vec{j}$ ponaša se kao i slobodni vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$. Znači, na proizvoljno izabranom pravcu vektor $\vec{j}$ ima projekciju određenu izrazom (5.4.21a). Tada projekcija na bilo koji drugi pravac u principu ne može da bude poznata (niti određena). Zbog toga, kao i vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$, vektor $\vec{j}$ leži negde na površini kupe (sa napadnom tačkom u temenu kupe) koja je opisana oko odabranog pravca, a čiji je ugao određen uzajamnim odnosom kvantnih brojeva j i m_j. Kao i kod izraza (5.4.3) i ovde imamo:

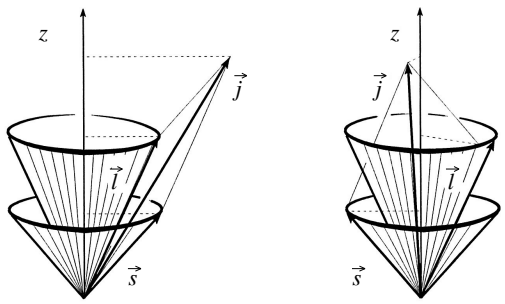
$$\cos\theta = \frac{j_z}{|\vec{j}|} = \frac{m_j}{\sqrt{j(j+1)}}. \tag{5.4.24}$$

Projektovanje vektora $\vec{j}$ na izabrani pravac šematski je prikazano na Slici 5.4.5b. Potpuna slika nešto je složenija nego ranije, jer je vektor $\vec{j}$ zbir orbitnog i spinskog ugaonog momenta koji i dalje precesuju oko njega. Sada je malo teže da se slikovito prikaže deo prostora u kojem mogu da se nađu vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ (svaki se nalazi negde na površini sopstvene precesione kupe, čija osa leži negde na površini kupe koja je opisana oko proizvoljno izabranog pravca) ali taj detalj u modelu i nije naročito važan. Mnogo je važnije pitanje šta je sa magnetnim kvantnim brojevima m_l i m_s odnosno da li se (i kako se) orbitni i spinski ugaoni momenti kvantuju duž odabranog pravca.

Sa Slike 5.4.5b očigledno je da je $m_j = const.$ sve dok vektor $\vec{j}$ ima stalni intenzitet. Vektor $\vec{j}$ ima stalni intenzitet sve dok je ugao između vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$ stalan. Ugao između vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$ je stalan sve dok su vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ spregnuti. A, kada su vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ spregnuti onda oni precesuju oko stalnog vektora $\vec{j}$. Međutim, s obzirom na to da se osa precesije (pravac vektora $\vec{j}$) ne poklapa sa osom projektovanja (koja je ovde proizvoljno odabrana i obeležena kao z-osa), vidimo da projekcije vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$ na odabranu osu (z-osu) nisu stalne. To znači, da kvantni brojevi m_l i m_s ne mogu da budu jednovremeno određeni kada i kvantni broj m_j. Tada kažemo da za sistem spregnutih ugaonih momenata kvantni brojevi m_l i m_s nisu dobri kvantni brojevi. (Nisu dobri jer pomoću njih ne može da se opiše nijedna osobina sistema.) Kvantni brojevi l i s i tada su dobri kvantni brojevi jer se pomoću njih izražava veličina odgovarajućih ugaonih momenata $\vec{l}$ i $\vec{s}$. Dakle, sistem spregnutih ugaonih momenata (spinskog i orbitnog) opisuje se kvantnim brojevima l, s, j i m_j.

Pogledajmo sada šta se dešava sa ukupnim ugaonim momentom ako orbitni spinski momenti **nisu spregnuti**. Ovo srećemo kada je konstanta sprezanja veoma mala (na primer, elektron u atomu vodonika sa velikim glavnim kvantnim brojem) ili kada se spoljašnjim delovanjem izazove rasprezanje inače spregnutih momenata (na primer, delovanjem jakog magnetnog polja, videti odeljak 6.1.3). Izraz (5.2.18) kojim se opisuje sabiranje momenata važi i kada momenti nisu spregnuti ali tada ne

važi izraz (5.4.16a), koji je proistekao iz uslova za sprezanje momenata i koji pokazuje da je ukupni ugaoni moment stalan. Prema tome, možemo da zaključimo da u **odsustvu sprezanja** ugaonih momenata (ili pri njihovom **rasprezanju**) ukupni ugaoni moment nije stalan, tj. vektor $\vec{j}$ nije konstanta kretanja. Takva situacija šematski je predstavljena na Slici 5.4.6. Tada, u stvari, ukupni ugaoni moment uopšte ne može da se odredi jer neodređenost položaja orbitnog ugaonog momenta po njegovoj kupi nije ni u kakvoj vezi sa neodređenošću položaja spinskog ugaonog momenta na odgovarajućoj kupi. Znači, u jednom trenutku ukupni ugaoni moment mogao bi da ima izvesnu vrednost, koja je već u sledećem trenutku drukčija, kao što je šematski prikazano na Slici 5.4.6. Drugim rečima, kada ugaoni momenti nisu spregnuti ili kada su raspregnuti, ponašaju se kao izolovani momenti koji ne primećuju prisustvo susednog momenta. Zbog toga nespregnuti (raspregnuti) ugaoni momenti, u proizvoljno izabranom pravcu, imaju projekcije određene kao i ranije. Tada su kvantni brojevi m_l i m_s dobri kvantni brojevi. Ako se sistem nespregnutih ili raspregnutih momenata nađe u spoljašnjem magnetnom polju, tada u tom polju svaki moment precesuje sopstvenom Larmorovom frekvencijom. Pošto su, uopšteno gledano, precesione frekvencije različite, to će i vektorski zbir momenata tokom vremena da bude promenljiv, pa je time i ukupni ugaoni moment neodređen.



Slika 5.4.6 Slaganje orbitnog i spinskog ugaonog momenta kada između njih **ne postoji sprezanje**. Svaki moment zadržava sopstvene osobine nezavisno od prisustva drugog momenta. Pošto se svaki nalazi na površini sopstvene kupe pod relativnim uglovima koji, u principu, ne mogu da se utvrde, to je i njihov zbir, dakle, ukupni ugaoni moment $\vec{j}$, u osnovi neodređen. Tada su, međutim, kvantni brojevi m_l i m_s dobri kvantni brojevi jer imaju diskretne, stalne vrednosti kao kod slobodnih momenata.

Dakle, kada nema sprezanja (ili prilikom rasprezanja) ugaonih momenata, ukupni ugaoni moment ne može da se odredi. Stanje sistema određuje se kvantnim brojevima l, m_l, s i m_s. Do sada smo posmatrali jednoelektronski atom u kojem dolazi do slaganja orbitnog i spinskog ugaonog momenta. Takav sistem predstavlja samo posebnan slučaj opšteg problema slaganja ugaonih momenata. Sistem može da se sastoji od različitih momenata, na primer, od dve čestice koje imaju samo spinski moment, dve čestice koje imaju samo orbitni ugaoni moment, čestice sa spinom koja se nalazi na rotirajućem molekulu, itd. Jasno je da postoje neka zajednička načela za sve sisteme koje smo pomenuli u svakom pojedinačnom slučaju. Ovde ćemo, za opšti slučaj sistema koji čine dva ugaona momenta, $\vec{j}_1$ i $\vec{j}_2$, određena kvantnim brojevima $\vec{j}_1$ i $\vec{j}_2$, da navedemo osnovna načela za njihovo slaganje, ne ulazeći u postupke kojima se do njih došlo:

a) Dužina (intenzitet) vektora ukupnog ugaonog momenta je $\sqrt{j(j+1)}$ Plankovih jedinica ($\hbar$-jedinica), gde kvantni broj ukupnog ugaonog momenta, j, može da ima neku od vrednosti određenu Klebš-Gordanovom serijom:

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \ldots, |j_1 - j_2| + 1 |j_1 - j_2|; \tag{5.4.25}$$

b) Vektor ukupnog ugaonog momenta leži negde na kupi koja je opisana oko proizvoljnog pravca u odnosu na koji se određuje njegova projekcija. (Pošto se pravac duž kojeg se vektor projektuje najčešće određuje spoljašnjim magnetnim poljem, to je najpogodnije i pravac i polje orijentisati duž z-ose.);

c) Intenziteti komponentnih ugaonih momenata su $\sqrt{j_1(j_1+1)}$ i $\sqrt{j_2(j_2+1)}$ $\hbar$-jedinica. Oni imaju određene vrednosti i kada vektor $\vec{j}$ ima određenu vrednost;

d) Projekcija ukupnog ugaonog momenta na z-osu iznosi $m_j\hbar$-jedinica. Kod predstavljanja preko sprezanja (dakle, kada je kvantni broj j određen) vrednost m_{j1} i m_{j2} su neodređene ali je njihov zbir jednak vrednosti m_j;

e) Kod predstavljanja preko **nespregnutih** vektora, kada je kvantni broj j neodređen, pojedine komponente m_{j1} i m_{j2} imaju diskretne, stalne vrednosti, pa su tada m_{j1} i m_{j2} dobri kvantni brojevi.

Prema tome, sistem koji se sastoji od dva ugaona momenta određen je sa četiri kvantna broja. Kod predstavljanja preko **spregnutih** vektora to su j_1, j_2, j i m_j, a kod predstavljanja preko **nespregnutih** vektora to su j_1, m_{j1}, j_2 i m_{j2}. Formalno gledano, izbor načina predstavljanja sistema je proizvoljan. Različita predstavljanja su samo različiti načini za posmatranje složenih sistema. Normalno, najjasniji opis sistema dobija se kada predstavljanje zaista odgovara fizičkoj prirodi sistema. Tamo gde postoji sprezanje između ugaonih momenata pogodnije je predstavljanje preko spregnutih vektora. Na primer, jednačine kretanja ugaonih momenata prilikom spin-orbitnog međudejstva mnogo su očiglednije i sažetije kada se izraze preko vektora ukupnog ugaonog momenta, jednačina (5.4.15), dakle, u predstavljanju preko sprezanja, nego preko pojedinih momenata (predstavljanjem preko nespregnutih vektora), izrazi (5.4.10) i (5.4.11).

5.4.4 Ukupni magnetni moment

U prethodnom odeljku videli smo kako se vektorskim sabiranjem orbitnog i spinskog ugaonog momenta dobija ukupni ugaoni moment jednoelektronskog atoma. Pošto su i orbitni ugaoni moment i spinski ugaoni moment praćeni odgovarajućim magnetnim momentima, jasno je da je i ukupni ugaoni moment, $\vec{j}$, praćen **ukupnim magnetnim momentom** $\vec{\mu}_j$.

Kao što ukupni ugaoni moment dobijamo vektorskim sabiranjem ugaonih momenata:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \tag{5.4.18}$$

tako i ukupni magnetni moment $\vec{\mu}_j$ dobijamo sabiranjem orbitnog $\vec{\mu}_l$, i spinskog $\vec{\mu}_s$ magnetnog momenta:

$$\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s . \tag{5.4.26a}$$

Zamenom momenata $\vec{\mu}_l$ i $\vec{\mu}_s$ iz jednačina (5.4.6b) i (5.4.8b) u jednačinu (5.4.26a), uz $g_l = 1$ i $g_s \approx 2$, ukupni **magnetni** moment $\vec{\mu}_j$ možemo da izrazimo kao vektorski zbir odgovarajućih ugaonih momenata:

$$\vec{\mu}_j = -\frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{l} + 2\vec{s}) \tag{5.4.26b}$$

i s obzirom na (5.4.18):

$$\vec{\mu}_j = -\frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{j} + \vec{s}) . \tag{5.4.26c}$$

Iz poslednjeg izraza vidimo da ukupni magnetni moment $\vec{\mu}_j$ ne leži na istom pravcu kao ugaoni moment $\vec{j}$. (U prethodnom odeljku videli smo da $\vec{j}$ i $\vec{s}$ ne mogu da leže na istom pravcu.) Sabiranje vektora magnetnih momenata šematski je prikazano na Slici 5.4.7. Pravac vektora $\vec{\mu}_j$, saglasno izrazu (5.4.26c), poklapa se sa pravcem rezultante vektora $\vec{j} + \vec{s}$.

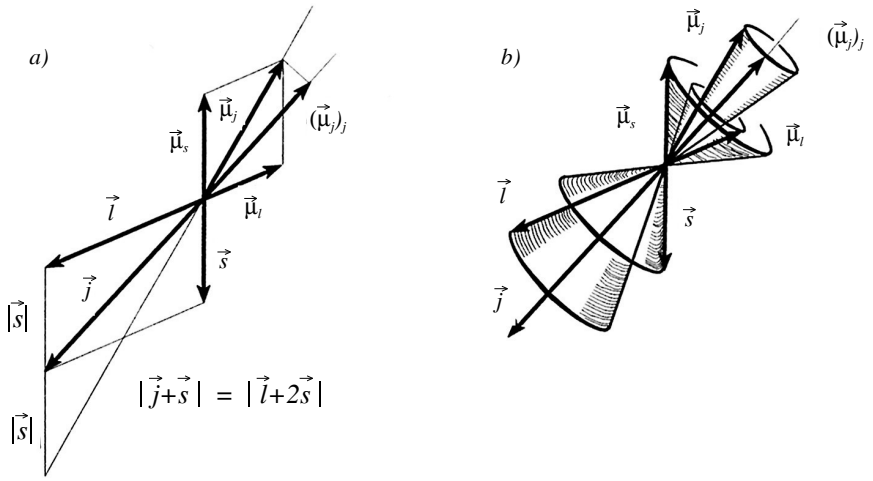
Ranije smo videli da spregnuti vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ precesuju oko pravca ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$. Očigledno je da će i svi ostali vektori precesovati oko istog pravca. Dakle, vektor ukupnog magnetnog momenta $\vec{\mu}_j$ precesuje oko pravca vektora ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$. Zbog stalne promene pravca, intenzitet vektora $\vec{\mu}_j$ ne može da se meri eksperimentalno. Međutim, vrednost vektora $\vec{\mu}_j$ usrednjena po vremenu (u intervalu mnogo dužem od perioda precesije) jednaka je njegovoj projekciji na pravac precesovanja (pravac vektora $\vec{j}$). Dakle, zbog precesije ukupnog magnetnog momenta $\vec{\mu}_j$ oko ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$, magnetne osobine atoma uslovljene su stvarnim magnetnim momentom $(\vec{\mu}_j)_j$, koji predstavlja projekciju vektora $\vec{\mu}_j$ na pravac vektora $\vec{j}$, Slika 5.4.7b:

$$(\vec{\mu}_j)_j = -|\vec{\mu}_j| \cos(\vec{\mu}_j \vec{j})\, \vec{j}^{\circ} . \tag{5.4.27a}$$

Znak minus pokazuje da je vektor stvarnog magnetnog momenta $(\vec{\mu}_j)_j$ antiparalelan vektoru ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$. Podsećamo na to da je $\vec{j}^{\circ}$, kao i ranije, jedinični vektor u pravcu ukupnog ugaonog momenta.

Stvarni magnetni moment $(\vec{\mu}_j)_j$ na drugi način može da se izrazi projektovanjem njegovih komponenata na pravac vektora $\vec{j}$. Tako, projektovanjem izraza (5.4.26c) na pravac vektora $\vec{j}$, nalazimo:

$$(\vec{\mu}_j)_j = -\frac{\mu_B}{\hbar}[|\vec{j}| \cos(\vec{j} \cdot \vec{j}) + |\vec{s}| \cos(\vec{s} \cdot \vec{j})]\, \vec{j}^{\circ} . \tag{5.4.27b}$$



Slika 5.4.7 Sabiranje ugaonih i magnetnih momenata: a) ukupni ugaoni moment $\vec{j}$ dobija se vektorskim sabiranjem orbitnog i spinskog momenta impulsa, $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$. Ukupni magnetni moment $\vec{\mu}_j$ proporcionalan je zbiru $(\vec{l} + 2\vec{s})$ odnosno $(\vec{j} + \vec{s})$. Zbog toga vektori $\vec{j}$ i $\vec{\mu}_j$ ne leže na istom pravcu; b) pošto magnetni momenti μ_l i μ_s deluju jedan na drugoga, ceo sistem spregnutih vektora precesuje oko pravca ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$. Takođe, i vektor $\vec{\mu}_j$ precesuje oko pravca vektora $\vec{j}$. Pri jakom sprezanju precesija je brza, pa eksperimentalno može da se opazi samo projekcija vektora $\vec{\mu}_j$ na osu precesije $(\vec{\mu}_j)_j$.

Pošto je stvarni magnetni moment $(\vec{\mu}_j)_j$ antiparalelan vektoru $\vec{j}$, veza između njih može da se formalno napiše na isti način kao i veza između magnetnih i ugaonih orbitnih (ili spinskih) momenata. Slično izrazima (5.4.6a) i (5.4.8a), imamo:

$$(\vec{\mu}_j)_j = -g_j \mu_B \frac{\vec{j}}{\hbar} \tag{5.4.28}$$

gde je g_j - Landeov g-faktor za ukupne momente, dakle, za jednoelektronski atom kao celinu.

Upoređivanjem izraza (5.4.27b) i (5.4.28) nalazimo da je Landeov g-faktor atoma:

$$g_j = 1 + \frac{|\vec{s}|}{|\vec{j}|}\cos(\vec{s}\cdot\vec{j}) . \tag{5.4.29a}$$

Landeov g-faktor predstavlja odnos žiromagnetnih osobina atoma prema žiromagnetnim osobinama orbitnog elektrona. Njegovu izrazitu zavisnost od kvantnih brojeva l, s i j lako nalazimo iz jednačine (5.4.29a). Ako uočimo da je:

$$\vec{s}\cdot\vec{j} = |\vec{s}||\vec{j}|\cos(\vec{s}\cdot\vec{j}).$$

Landeov g-faktor atoma možemo da izrazimo kao:

$$g_j = 1 + \frac{\vec{s}\cdot\vec{j}}{|\vec{j}|^2}. \tag{5.4.29b}$$

Skalarni proizvod $\vec{s}\cdot\vec{j}$ lako nalazimo iz izraza (5.4.18):

(5.4.18)
$$\begin{aligned}
\vec{j} &= \vec{l} + \vec{s} \\
\vec{l} &= \vec{j} - \vec{s} \\
|\vec{l}|^2 &= (\vec{j} - \vec{s})^2 \\
|\vec{l}|^2 &= |\vec{j}|^2 + |\vec{s}|^2 - 2\vec{s}\cdot\vec{j} \\
\vec{s}\cdot\vec{j} &= \frac{|\vec{j}|^2 - |\vec{l}|^2 + |\vec{s}|^2}{2}
\end{aligned}$$

što zamenom u (5.4.29b) daje:

$$g_j = 1 + \frac{|\vec{j}|^2 - |\vec{l}|^2 + |\vec{s}|^2}{2|\vec{j}|^2}. \tag{5.4.29c}$$

Unošenjem vrednosti za kvadrate vektora ugaonih momenata iz (5.4.19c), (5.4.1c) i (5.4.4c), najzad dobijamo:

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}. \tag{5.4.29d}$$

Iz jednačine (5.4.29d) vidimo da se atomski g-faktor za $s = 0$ ($j = l$) svodi na orbitni $g_j = g_l = 1$, a za $l = 0$ (tada je $j = s$) na spinski $g_j = g_s \approx 2$. Dakle, atomski g-faktor za jednoelektronski atom zavisno od vrednosti kvantnih brojeva l, s i j može da ima vrednosti između 1 ($g_j = g_l$) i 2 ($g_j = g_s$).

Landeov g-faktor ima veliki značaj jer se preko njega izražavaju magnetne osobine atoma. On se javlja zbog razlike u žiromagnetnim odnosima između orbitnih i spinskih momenata.

5.4.5 Spin-orbitno sprezanje

Ovde ćemo da dovršimo razmatranje započeto u odeljku 5.3 koje smo prekinuli zbog toga što u okviru poluklasične slike nismo mogli valjano da izrazimo skalarni proizvod orbitnog i spinskog ugaonog momenta, jednačina (5.3.6). Skalarni proizvod možemo da izrazimo preko kvantnih brojeva j, l i s koristeći vektorski model. Korišćenjem srednje vrednosti $1/r^3$, preuzete iz kvantne mehanike, nalazimo **tačan** izraz za konstantu spin-orbitnog međudejstva jednoelektronskog atoma.

Dakle, energiju spin-orbitnog međudejstva izražavamo preko konstante spin--orbitnog sprezanja, a:

(5.3.6b) $$\mu_{l,s} = a\frac{\vec{l}\cdot\vec{s}}{\hbar^2} \tag{5.4.30}$$

gde je:

(5.3.7b) $$a = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\overline{\left(\frac{1}{r^3}\right)}. \tag{5.4.31}$$

U odeljku 5.3.2 dobili smo približan izraz za konstantu spin-orbitnog sprezanja a, koristeći srednju vrednost $(1/r^3)$ iz Borovog modela:

$$\overline{\left(\frac{1}{r^3}\right)} = \frac{1}{r^3} = \frac{1}{r^3}\frac{Z}{n^6}$$

gde je r_1 atomski poluprečnik prve Borove orbite atoma vodonika. **Tačan** izraz za konstantu spin-orbitnog sprezanja a može da se dobije ako se preuzme kvantnomehanički izračunata srednja vrednost (l/r^3) za atom sličan vodoniku:

$$\overline{\left(\frac{1}{r^3}\right)} = \frac{1}{r^3} = \frac{1}{r_1^3}\frac{Z^3}{n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}. \tag{5.4.32}$$

Ako ovaj izraz uporedimo sa odgovarajućim izrazom iz Borovog modela, vidimo da se **tačna** vrednost konstante spin-orbitnog sprezanja a dobija iz približnog izraza (5.3.7e) zamenom faktora n^6 izrazom $n^3 l(l + {}^1/_2)(l + 1)$:

$$a = E_0\alpha^2\frac{Z^4}{n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}. \tag{5.4.33}$$

Skalarni proizvod $\vec{l}\cdot\vec{s}$ u izrazu (5.4.30) izračunavamo iz kvadrata jednačine (5.4.18):

(5.4.18)
$$\begin{aligned} \vec{j} &= \vec{l}+\vec{s} \\ |\vec{j}|^2 &= (\vec{l}+\vec{s})^2 \\ |\vec{j}|^2 &= |\vec{l}|^2 + |\vec{s}|^2 + 2\vec{l}\cdot\vec{s} \\ \vec{l}\cdot\vec{s} &= \frac{|\vec{j}|^2 - |\vec{l}|^2 - |\vec{s}|^2}{2}. \end{aligned} \tag{5.4.34}$$

Zamenom odgovarajućih kvadrata vektora iz (5.4.19c), (5.4.1c) i (5.4.4c), nalazimo:

$$\frac{\vec{l}\cdot\vec{s}}{\hbar^2} = \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\,. \tag{5.4.35}$$

Uvrštavanjem dobijenog izraza u jednačinu (5.4.30) dobijamo **tačnu** jednačinu za energiju spin-orbitnog međudejstva u atomima sličnim vodoniku:

$$U_{l,s} = \frac{1}{2}a[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \tag{5.4.36a}$$

odnosno pomoću (5.4.44):

$$U_{l,s} = \frac{E_0\alpha^2 Z^4}{2}\frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\,. \tag{5.4.36b}$$

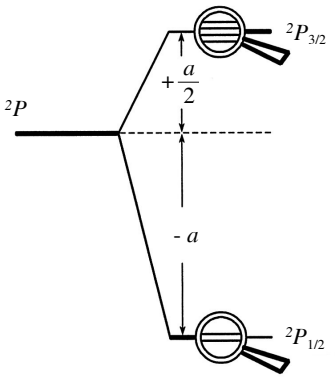
Iz jednačine (5.4.36b) struktura energijskih nivoa za svaki spektralni term dobija se zamenom odgovarajućih vrednosti kvantnih brojeva *j, l* i *s*. Na primer, za term ^2P imamo:

$l = 1$ (jer je u pitanju *P* term),
$s = {}^1/_2$ (jer je multipletnost 2, $2s + 1 = 2$),
$j_1 = l + {}^1/_2 = {}^3/_2$, $\qquad j_2 = l - {}^1/_2 = {}^1/_2$,
pa je:

$$U_{j_1} = \frac{1}{2}a$$

$$U_{j_2} = -a$$

što je šematski prikazano na Slici 5.4.8. Ovu situaciju, formalno izvedenu iz jednačine (5.4.36a) lako je razumeti u okviru vektorskog modela kao posledicu međudejstva spinskog magnetnog momenta $\vec{\mu}_s$ i lokalnog magnetnog polja orbitnog kretanja $\vec{B}_l$. Kada su vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ „paralelni", dakle, kada je $j = {}^3/_2$, vektori $\vec{\mu}_s$ i $\vec{B}_l$ su „antiparalelni" jer je vektor $\vec{\mu}_s$ antiparalelan sa $\vec{s}$, dok je vektor $\vec{B}_l$ paralelan sa $\vec{l}$. (Izraz „paralelni" ovde označava samo da je ugao θ između naznačenih vektora manji od $\pi/2$, tj. da je $\cos\theta > 0$. Na isti način za „antiparalelne" vektore je $\cos\theta < 0$.) Saglasno jednačini (D-5.2.13b) energija međudejstva magnetnog momenta i „antiparalelnog" spoljašnjeg polja je **pozitivna**. Na isti način za $j = {}^1/_2$ $\vec{l}$ i $\vec{s}$ su „antiparalelni", a $\vec{\mu}_s$ i $\vec{B}_l$ su „paralelni", dakle $\cos\theta > 0$, pa je energija međudejstva negativna. Zbog toga je energija terma pri $j = {}^3/_2$ pozitivna, a pri $j = {}^1/_2$ negativna u odnosu na energiju istog terma kada ne bi bilo spin-orbitnog sprezanja. Treba uočiti to da energija spektralnog terma ne zavisi od magnentog kvantnog broja m_j, tj. od usmerenja ukupnog ugaonog momenta u prostoru. To znači da u višem stanju označenom sa $^2P_{3/2}$, postoji $2 \times {}^3/_2 + 1 = 4$, a u nižem stanju, koje se označav sa $^2P_{1/2}$



Slika 5.4.8 Cepanje ^2P terma zbog spin-orbitnog međudejstva. U odsustvu međudejstva, energija stanja sa različitim j-vrednostima je ista. Dakle, stanja su degenerisana sa stepenom degeneracije $(2j_1 + 1) + (2j_2 + 1)$ što za $j_1 = {}^1/_2$ i $j_2 = {}^3/_2$ iznosi 6. Spin-orbitno međudejstvo uklanja degeneraciju nivoa sa različitim j-vrednostima. Međutim, novi energijski nivoi i dalje su degenerisani i to za $j = {}^1/_2$ dvostruko, a za $j = {}^3/_2$ četvorostruko. Uočimo da spin-orbitno međudejstvo ne menja težište novih nivoa u odnosu na originalni nivo.

ima $2 \times {}^1/_2 + 1 = 2$ degenerisana nivoa, Slika 5.4.8. Ovo važi u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja. Pojava spoljašnjeg polja, kao što će se videti u 6. poglavlju, uklanja degeneraciju i naznačeni energijski nivoi cepaju se na pojedinačne komponente. Tako se nivo $^2P_{3/2}$ cepa na četiri, a nivo $^2P_{1/2}$ na dve komponente.

Isto tako, važno je uočiti da se uzimanjem u obzir spin-orbitnog međudejstva „težište" energijskih nivoa ne menja. Term $^2P_{1/2}$ pomeren je za $-a$, a term $^2P_{3/2}$ za $+ {}^1/_2\, a$. Međutim, ako uzmemo u obzir njihove statističke težine, a one su 2 i 4, nalazimo da je rezultujući pomak jednak nuli, tj. da je „težište" nepromenjeno:

$(-a)2 + ({}^1/_2\, a)4 = 0.$

Na kraju, ono što smo saznali o finoj strukturi jednoelektronskih stanja možemo sažeti na sledeći način:

a) Međudejstvo spinskog magnetnog momenta i lokalnog magnetnog polja orbitnog kretanja, izraženo kao međudejstvo spinskog ugaonog i orbitnog ugaonog momenta, cepa svaki energijski nivo na dva dela. Rezultat toga je dubletna struktura nivoa. Na primer, gornje stanje iz kojeg nastaje natrijumova D linija, $3P$ stanje, cepa se na stanja $3P_{1/2}$ i $3P_{3/2}$, kao što je pokazano na Slici 5.4.8;

b) S termovi se ne cepaju pošto pri $l = 0$ ne postoji lokalno magnetno polje $\vec{B}_l$ u kojem bi spinski magnetni moment pri različitim usmerenjima zadobijao različite energije;

c) Nivoi sa većim vrednostima kvantnog broja j imaju veće energije, jednačina (5.4.36a);

d) Konstanta spin-orbitnog sprezanja a proporcionalna je četvrtom stepenu naelektrisanja jezgra.

Primeri

Primer 5.4.1 Pokazati da za jednoelektronski atom cepanje energijskih nivoa prouzrokovano spin-orbitnim međudejstvom može da se izrazi jednačinom:

$$\Delta U_{j_1,j_2} = \frac{E_0 \alpha^2 Z^4}{n^3 l(l+1)} = a\left(l + \frac{1}{2}\right).$$

REŠENJE:

$$\Delta U_{j_1,j_2} = U_{j_1} - U_{j_2}$$

$$U_{j_1} = \frac{1}{2}a[j_1(j_1+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

(5.4.36a) $$U_{j_2} = \frac{1}{2}a[j_2(j_2+1) - l(l+1) - s(s+1)] .$$

Pošto se kvantni brojevi l i s ne menjaju (menja se samo j), nalazimo:

$$\Delta U_{j_1,j_2} = U_{j_1} - U_{j_2} = \frac{1}{2}a[j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)] \qquad \text{(P-5.4.1.1)}$$

$$= \frac{1}{2}a(j_1 - j_2)(j_1 + j_2 + 1) .$$

Za jednoelektronski atom je:

$$(j_1 - j_2) = 1 \qquad \text{i} \qquad (j_1 + j_2) = 2l$$

što zamenom u (P-5.4.1.1) daje:

$$\Delta U_{j_1,j_2} = \frac{1}{2}a(2l+1) = a\left(l + \frac{1}{2}\right) . \qquad \text{(P-5.4.1.2a)}$$

Zamenom konstante spin-orbitnog sprezanja a iz (5.4.33), najzad dobijamo:

$$U_{j_1,\,j_2} = \frac{E_0 \alpha^2 Z^4}{n^3 l(l+1)} . \qquad \text{(P-5.4.1.2b)}$$

Primer 5.4.2 Izračunati veličinu magnetne indukcije u atomu natrijuma, koja nastaje orbitnim kretanjem elektrona u stanju iz kojeg se javljaju dve natrijumove D linije (588,995 nm, 589,592 nm).

REŠENJE:

Natrijumov dublet javlja se pri prelazu iz stanja $l = 1$ u stanje sa $l = 0$. Razdvojeno je samo ono stanje pri $l = 1$. Razliku u energijama između dva podstanja, $3P_{1/2}$ i $3P_{3/2}$, dobijamo iz razlike talasnih dužina prema izrazu:

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$

$$|\Delta E| = \frac{hc|d\lambda|}{\lambda^2}$$

$$|\Delta E| = \frac{6{,}62\times10^{-34}\times3\times10^{8}\times0{,}597\times10^{-9}}{(589\times10^{-9})^2} = 3{,}42\times10^{-22} J .$$

Ova energijska razlika shvaćena kao međudejstvo spinskog magnetnog momenta $\vec{\mu}_s$, i lokalnog magnetnog polja $\vec{B}_l$, može da se izrazi kao razlika energija elektrona u dva spinska stanja sa $m_s = +1/2$ i $m_s = -1/2$. Dakle:

$$U = g_s m_s \mu_B B_l$$

$$\Delta U = g_s \Delta m_s \mu_B B_l$$

(5.2.15b)
$$g_s = 2, \quad \Delta m_s = \left(\frac{1}{2} - -\frac{1}{2}\right) = 1,$$

$$\Delta U = 2\mu_B B_l .$$

Traženu indukciju nalazimo iz poslednjeg izraza, zamenom vrednosti energijske razlike $\Delta U = \Delta E$ i Borovog magnetona μ_B:

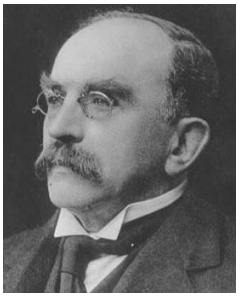
$$\mu_B = 9{,}274\times10^{-24} JT^{-1}$$

(5.1.9c)
$$B_l = \frac{\Delta E}{2\mu_B} = \frac{3{,}42\times10^{-22} J}{2\times 9{,}274\times10^{-24} JT^{-1}} = 18{,}4T .$$

Zadaci

Z–5.4.1 Izračunati moguće vrednosti skalarnog proizvoda $\vec{l}\cdot\vec{s}$ ako je $l = 3$ i $s = 1/2$.
$[\vec{l}\cdot\vec{s} = 3/2\,\hbar^2, -2\hbar^2]$.

Z–5.4.2 Izračunati $\vec{l}\cdot\vec{s}$ za elektron u $^2D_{3/2}$ stanju.
$[\vec{l}\cdot\vec{s} = -3/2\,\hbar^2]$.



Ser Džozef Larmor (Sir Joseph Larmor, 1857–1942), engleski fizičar i matematičar, profesor matematike na Kembridžu. Bavio se teorijskom fizikom, posebno teorijom elektrona, u okviru koje je otkrio precesiju, kasnije po njemu nazvanu Larmorova precesija.

6. ATOM U MAGNETNOM POLJU

Ključni dokazi u stvaranju savremenih predstava o strukturi materije dobijeni su iz eksperimentalnog i teorijskog razmatranja osobina atoma u magnetnom polju. Holandski fizičar, Pieter Zeeman, još 1886. godine je opazio da u spektru dobijenom iz atoma koji se nalaze u magnetnom polju dolazi do cepanja originalnih spektralnih linija na više komponenata. Ova pojava, danas poznata kao Zemanov efekt, predstavljala je najveće iskušenje za sve prekvantne teorije jer su one bile u stanju da ga valjano opišu samo delimično.

Drugi ogled neposredno vezan za osobine atoma u magnetnom polju izveli su Štern i Gerlah (O. Stern, W. Gerlach), 1921. godine. Ogled je postavljen i izveden sa jedinim ciljem da eksperimentalno potvrdi postojanje prostorne kvantizacije, tj. da pokaže diskretna usmerenja atomskog ugaonog momenta duž proizvoljno odabranog pravca.

Dakle, ispitivanjem osobina atoma u magnetnom polju započela je potraga za novom teorijom koja može na zadovoljavajući način da opiše pojave na atomskom nivou (Zemanov efekt). Pored toga, takva ispitivanja dala su neposrednu eksperimentalnu potvrdu osnovnom načelu, delom već uobličene, nove teorije o kvantnoj prirodi mikrosveta.

U razmatranjima osobina atoma u magnetnom polju ovde nećemo slediti vremenski tok događaja. Prvo ćemo da razmotrimo ponašanje vektora ugaonog momenta u magnetnom polju, onako kako to sledi iz vektorskog modela. Zatim ćemo na osnovu toga da opišemo prvo Štern–Gerlahov ogled, a potom normalni i anomalni Zemanov efekt.

6.1 UGAONI MOMENT U MAGNETNOM POLJU

Ovde razmatramo osobine vektora ugaonog momenta u magnetnom polju da bismo lakše objasnili Štern-Gerlahov ogled i Zemanov efekt. Sam razvoj tekao je, međutim, drukčije: vektorski model je postavljen na osnovu rezultata ovih ogleda.

Poluklasični opis osnovnih osobina orbitnog i spinskog ugaonog momenta dat je u odeljku 5.2. Vektor ugaonog momenta u magnetnom polju precesuje i postavlja se u jednu od mogućih diskretnih orijentacija. Vektorski model, odeljak 5.4, bliže određuje moguće uglove orijentacija, kao i uslove projektovanja momenata na proizvoljno izabranu osu.

6.1.1 Orbitni ugaoni moment u magnetnom polju

Ugaoni moment određen kvantnim brojem l, može da ima $(2l + 1)$ projekcija u pravcu proizvoljno izabrane ose, Slika 6.1.1a. Pošto istovremeno ne može da se projektuje na dve ose, vektor ugaonog momenta leži negde na površini jedne od kupa. Energija ugaonog momenta van magnetnog polja ne zavisi od toga u kojoj kupi se on nalazi, tj. ne zavisi od njegove projekcije na izabranu osu. Kada magnetno polje indukcije $\vec{B}_0$ deluje duž izabranog pravca, ugaoni moment počinje da precesuje odgovarajućom Larmorovom frekvencijom:

(5.2.5)
$$\omega_{L,l} = -\gamma_l \vec{B}_0 \tag{6.1.1a}$$

$$\omega_{L,l} = \frac{\mu_B}{\hbar}\vec{B}_0 \tag{6.1.1b}$$

$$\omega_{L,l} = \frac{e}{2m}\vec{B}_0 . \tag{6.1.1c}$$

Larmorova frekvencija ista je za sva stanja l_z određena različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja m_l.

Međudejstvo ugaonog momenta, $\vec{l}$, i spoljašnjeg magnetnog polja, $\vec{B}_0$, odvija se preko magnetnog momenta, $\vec{\mu}_l$, pridruženog ugaonom momentu, $\vec{l}$. Zbog toga je energija ugaonog momenta u polju indukcije $\vec{B}_0$ određena energijom magnetnog međudejstva momenta $\vec{\mu}_l$ i polja $\vec{B}_0$:

$$U_{m,l} = -\vec{\mu}_l \cdot \vec{B} \tag{6.1.2a}$$

(5.2.11a)
$$U_{m,l} = -\mu_{l,z} B \tag{6.1.2b}$$

$$U_{m,l} = m_l \mu_B B \tag{6.1.2c}$$

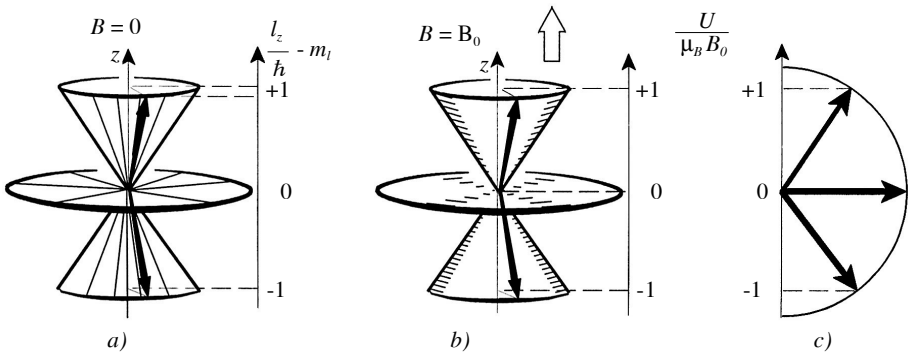
$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l. \tag{6.1.3}$$

Iz jednačine (6.1.2c) je očigledno da stanja sa različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja m_l imaju različite energije. Magnetno polje, dakle, uklanja degeneraciju.

Na Slici 6.1.1b šematski je prikazano ponašanje vektora ugaonog momenta u magnetnom polju. Činjenica da duž odabranog pravca deluje spoljašnje polje čija je indukcija $\vec{B}_0$ ne menja ništa u pogledu projektovanja vektora ugaonog momenta. Znači, vektor ugaonog momenta, kao i bez polja, može da se nađe na površini neke od $2l + 1$ kupa. Bitna razlika ogleda se u tome što u magnetnom polju dolazi do rotacije kupe kao celine (tj. do precesije vektora ugaonog momenta) i to Larmorovom frekvencijom koja je ista za sve kupe. Takođe, zbog uklanjanja degeneracije, u magnetnom polju stanja sa različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja m_l imaju

različite energije. Zbog toga se, saglasno jednačini (6.1.2c), prvobitna m_l osa preobražava u energijsku osu, Slika 6.1.1b.

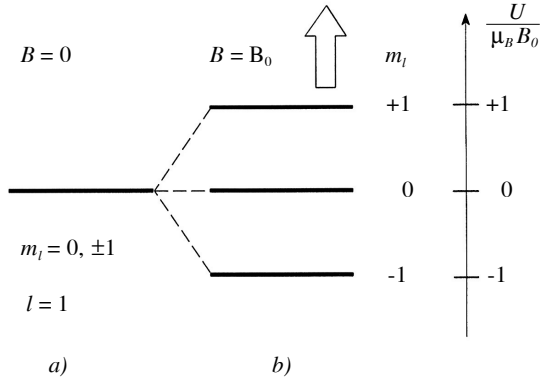
U brojnim slučajevima precesija nije bitna za objašnjavanje opaženih pojava, pa model orbitnih stanja može da se svede na skup vektora postavljenih pod različitim uglovima [određenih izrazom (5.4.3)] čije projekcije zadovoljavaju uslove (5.4.2), Slika 6.1.1c.



Slika 6.1.1 Orbitni ugaoni moment u magnetnom polju: a) u odsustvu polja ugaoni moment ima istu vrednost energije za sve vrednosti magnetnog kvantnog broja m_l. Stanja su degenerisana sa stepenom degeneracije $(2m_l + 1)$. Bez polja nema precesije. Kupama je predstavljen prostor u kojem vektor može da se nađe. „Kretanje" vektora unutar kupa nije određeno. Uslovno može da se smatra da je vektor „razmazan" po celoj površini kupe; b) u magnetnom polju dolazi do uklanjanja degeneracije stanja sa različitim vrednostima m_l, kao i do precesije ugaonog momenta. Vektor ugaonog momenta u rotirajućim kupama ima različite energije. Precesija može da se shvati kao rotacija kupe oko sopstvene ose (ose projektovanja). Rotirajuće kupe imaju međusobno različite energije. Međutim, sve kupe rotiraju istom frekvencijom koja je jednaka Larmorovoj precesionoj frekvenciji ω_L; c) pošto za opis najvećeg broja ogleda činjenica da ugaoni moment precesuje (odnosno da kupa rotira) nije bitna, to se šematski, zbog jednostavnosti, različita diskretna usmerenja ugaonog momenta predstavljaju izabranim vektorom čiji je intenzitet $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$. Energija svakog stanja proporcionalna je projekciji vektora na z-osu (pravac delovanja magnetnog polja).

Dalje pojednostavljenje modela postiže se tako što se umesto vektora šematski prikazuju samo njihova energijska stanja, čime se, zapravo, od vektorskog modela prelazi na model energijskih stanja. Na Slici 6.1.2 prikazano je ponašanje vektora ugaonog momenta u magnetnom polju sa energijskog stanovišta, tj. po modelu energijskih stanja. Prikazana su ista stanja kao i na Slici 6.1.1. U odsustvu magnetnog polja, stanja sa različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja m_l su degenerisana, tj. imaju istu energiju. Ako posmatramo samo magnetnu energiju, tada je prema izrazima (6.1.2) u odsustvu polja (B_0=0) ona jednaka nuli. U magnetnom polju, Slika 6.1.2b, dolazi do uklanjanja degeneracije – prvobitno (degenerisano) energijsko stanje cepa se na (2*l*+1) jednako udaljenih stanja, saglasno izrazima (6.1.2).

Osnovni nedostatak modela energijskih stanja leži u tome što se ne vide osnovni elementi fizičke slike stanja koja model predstavlja. (Na primer, ne vidi se da vektori ugaonog momenta precesuju.) Međutim, pri ispitivanju složenijih atomskih sistema to predstavlja njegovu ključnu prednost, jer oslobođen nepotrebnih detalja,



Slika 6.1.2 Uklanjanje degeneracije stanja orbitnog ugaonog momenta spoljašnjim magnetnim poljem: a) van polja energija orbitnog ugaonog momenta ne zavisi od vrednosti magnetnog kvantnog broja m_l; b) u magnetnom polju, zbog međudejstva polja i magnetnog momenta, $\vec{\mu}_l$ koji je pridružen ugaonom momentu, energija ugaonog momenta proporcionalna je magnetnom kvantnom broju, m_l.

na veoma jasan način pruža uvid u energijske odnose između različitih stanja koji se najčešće eksperimentalno jedino i određuju.

6.1.2 Spinski ugaoni moment u magnetnom polju

Osobine spinskog ugaonog momenta $\vec{s}$ u magnetnom polju dobrim delom su opisane u odeljku 5.2.3. Mogu da se izvedu i iz osobina orbitnog ugaonog momenta. Zamenom orbitnog kvantnog broja, l, spinskim kvantnim brojem, s, i orbitnog g-faktora (pošto je $g_l = 1$, on se najčešće ne piše u odgovarajućim izrazima) spinskim g-faktorom, g_s. Na Slici 6.1.3 prikazano je ponašanje spinskog magnetnog momenta u magnetnom polju indukcije $\vec{B}_0$. Van polja, vektor spinskog ugaonog momenta nalazi se „razmazan" na površini jedne od dve kupe. Pri tome su energije oba stanja jednake, dakle, postoji dvostruka degeneracija ($s={}^1/_2$, $2s + 1=2$). U magnetnom polju dolazi do precesije spinskih momenata Larmorovom frekvencijom $\vec{\omega}_{L,s}$ (5.2.12b):

$$\vec{\omega}_{L,s} = -\gamma_s \vec{B}_0 \tag{6.1.4a}$$

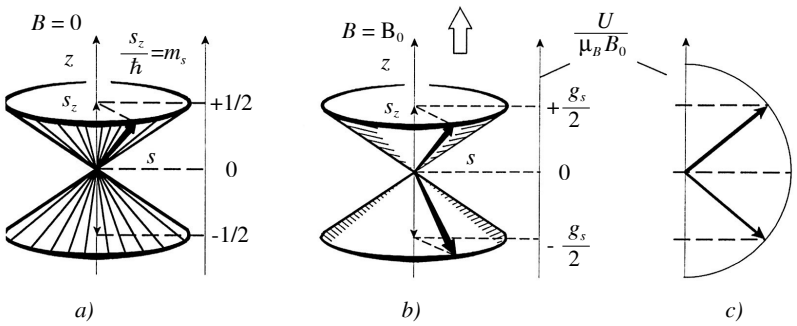
$$\vec{\omega}_{L,s} = -g_s \gamma_l \vec{B}_0 \tag{6.1.4b}$$

$$\vec{\omega}_{L,s} = +g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{B}_0 \tag{6.1.4c}$$

$$\vec{\omega}_{L,s} = +g_s \frac{e}{2m} \vec{B}_0 \tag{6.1.4d}$$

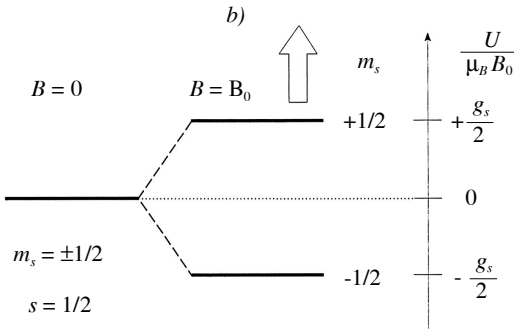
i do uklanjanja degeneracije. Originalno energijsko stanje, usled međudejstva spinskog magnetnog momenta $\vec{\mu}_s$ i spoljašnjeg magnetnog polja indukcije $\vec{B}_0$, cepa se na dva nivoa čije su energije:

(5.2.15c)
$$U_{m,s} = \pm \frac{1}{2} g_s \mu_B B_0 . \tag{6.1.5}$$



Slika 6.1.3 Spinski ugaoni moment u magnetnom polju: a) van polja vektor spinskog ugaonog momenta nalazi se negde na površini jedne od kupa koja je opisana oko proizvoljno izabrane ose projektovanja. Energije oba stanja za $m_s = +1/2$ i $m_s = -1/2$ su jednake; b) u spoljašnjem magnetnom polju vektor spinskog ugaonog momenta precesuje. Magnetno polje uklanja degeneraciju, pa stanja sa različitim vrednostima spinskog magnetnog kvantnog broja, m_s, imaju različite energije; c) izostavljanjem precesije iz modela, različita stanja mogu da se prikažu pomoću odgovarajućih vektora čija je energija u magnetnom polju proporcionalna njihovim projekcijama na pravac polja.

Spinski moment u magnetnom polju po modelu energijskih nivoa prikazan je na Slici 6.1.4. Van polja, magnetna energija spinskog momenta jednaka je nuli, dok u polju dolazi do cepanja nivoa na dva podnivoa, saglasno jednačini (6.1.5).



Slika 6.1.4 Spinski ugaoni moment u magnetnom polju: a) van polja spinski ugaoni moment u oba stanja ima istu energiju; b) magnetno polje uklanja degeneraciju, i stanja sa različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja imaju različite energije.

Treba uočiti da Slika 6.1.4 u pogledu energije spina u magnetnom polju pruža iste podatke kao i Slika 5.2.2. Međutim, s obzirom na to da je model energijskih nivoa oslobođen svih detalja u vezi sa precesijom, usmeravanjem vektora i njegovim projektovanjem na odabranu osu, Slika 6.1.4 je mnogo jasnija i bitni (energijski) odnosi su mnogo očigledniji.

6.1.3 Ukupni ugaoni moment u magnetnom polju

Za razliku od orbitnog i spinskog ugaonog momenta kod kojih veličina magnetne indukcije menja samo jačinu međudejstva, a ne i vrstu međudejstva, osobine ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$ u magnetnom polju zavise od jačine magnetnog polja. Ovde ćemo da razmotrimo dva krajnja slučaja kada je spoljašnje polje vrlo

slabo u poređenju sa lokalnim, atomskim, magnetnim poljem i kada je spoljašnje polje vrlo jako u odnosu na to lokalno polje.

Slabo magnetno polje, $U_{m,j} \ll U_{l,s}$

U slabom polju, kada je energija međudejstva $U_{m,j}$ ukupnog magnetnog momenta $(\vec{\mu}_j)_j$ sa spoljašnjim poljem $\vec{B}_0$ zanemarljivo mala u odnosu na energiju spin-orbitnog međudejstva $U_{l,s}$, osobine ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$, mogu da se dobiju iz osobina orbitnog ugaonog momenta. Potrebno je da se odgovarajuće orbitne veličine zamene ukupnim. Znači, ukupni ugaoni moment u magnetnom polju čija je indukcija $\vec{B}_0$, precesuje sopstvenom Larmorovom frekvencijom $\vec{\omega}_{L,j}$:

$$\vec{\omega}_{L,j} = -g_j \gamma_l \vec{B}_0 \qquad (6.1.6a)$$

(5.2.5b)
$$\vec{\omega}_{L,j} = + g_j \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{B}_0 \qquad (6.1.6b)$$

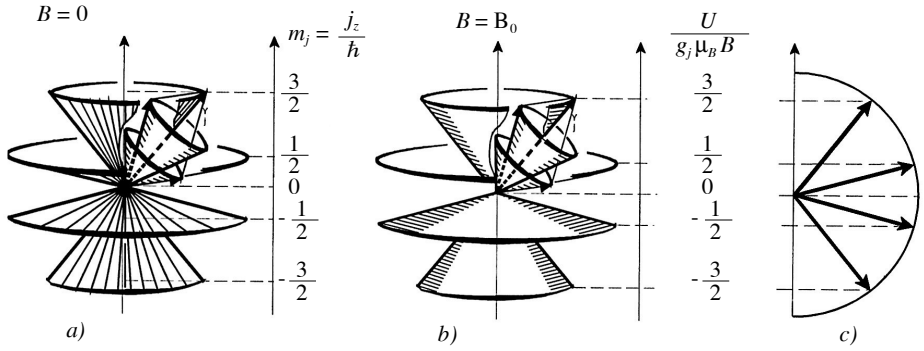
pri čemu precesiona frekvencija ne zavisi od vrednosti magnetnog kvantnog broja m_j. Magnetno polje uklanja degeneraciju energijskih stanja, i slično izrazima (6.1.2) i (6.1.5), nalazimo da zbog dejstva spoljašnjeg magnetnog polja indukcije $\vec{B}_0$ na ukupni magnetni moment $(\vec{\mu}_j)_j$, energija različitih stanja zavisi od vrednosti magnetnog kvantnog broja m_j:

(D-5.2.13a)
$$U_{m,j} = -(\vec{\mu}_j)_j \cdot \vec{B}_0 \qquad (6.1.7a)$$

(5.2.11c)
$$U_{m,j} = + g_j m_j \mu_B B_0 \,. \qquad (6.1.7b)$$

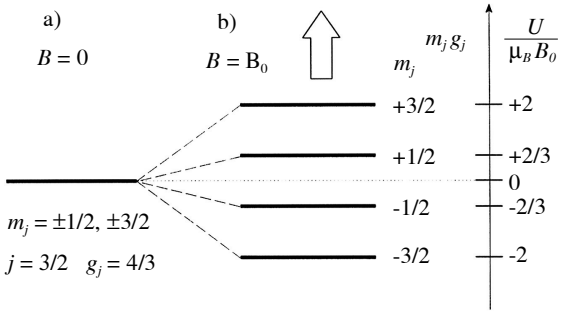
Ukupni ugaoni moment, $\vec{j}$, u slabom magnetnom polju, šematski je prikazan na Slici 6.1.5. Jedina razlika u odnosu na prethodne slučajeve ogleda se u tome što je vektor $\vec{j}$ složen i što njegove komponente $\vec{l}$ i $\vec{s}$ precesuju oko njega čak i u odsustvu spoljašnjeg polja. U spoljašnjem magnetnom polju, vektor ukupnog ugaonog momenta precesuje, stvarajući precesionu kupu kao i slobodni vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ u prethodnim slučajevima. Međutim, ovde spregnuti vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ izvode složeno kretanje. Oni precesuju oko vektora ukupnog ugaonog momenta, $\vec{j}$, a zatim zajedno s njim oko vektora spoljašnjeg magnetnog polja. Sve dok je uzajamno delovanje vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$ (spin-orbitno međudejstvo) mnogo jače od međudejstva vektora $(\vec{\mu}_j)_j$ sa spoljašnjim magnetnim poljem $\vec{B}_0$, frekvencija kojom vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ precesuju oko vektora $\vec{j}$ mnogo je veća od frekvencije $\vec{\omega}_{L,j}$. Tada, dodatno precesiono kretanje vektora $\vec{j}$ (oko pravca spoljašnjeg magnetnog polja) frekvencijom $\vec{\omega}_{L,j}$ ne utiče na prvobitnu precesiju vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$, tako da intenzitet vektora $\vec{j}$, saglasno jednačini (5.4.18), ostaje očuvan.

Na Slici 6.1.6 prikazan je dijagram energijskih stanja ukupnog ugaonog momenta, $\vec{j}$, u magnetnom polju indukcije $\vec{B}_0$. Bez polja, magnetna energija sistema



Slika 6.1.5 Ukupni ugaoni moment $\vec{j}$ u **slabom** magnetnom polju: a) zbog spin-orbitnog međudejstva, i u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ precesuju oko vektora $\vec{j}$ koji ima stalni intenzitet. Vektor $\vec{j}$ može da se nađe na jednoj od (2J + 1) kupa koje su opisane oko proizvoljno izabrane ose na koju se vektor $\vec{j}$ projektuje. Energija ukupnog ugaonog momenta ne zavisi od toga u kojoj kupi se nalazi; b) ako duž odabrane ose deluje spoljašnje magnetno polje, tada kupe verovatnoće počinju da rotiraju, zapravo, vektor $\vec{j}$ da precesuje. Tada energija vektora ukupnog momenta zavisi od ugla koji kupa zaklapa sa osom (tačnije, od projekcije vektora $\vec{j}$ na izabranu osu), dok je precesiona frekvencija ista za sve kupe; c) ako se precesija kao pojava izostavi iz modela, tada stanja sa različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja m_j mogu da se predstave stacionarnim vektorima $\vec{j}$ koji zaklapaju različite uglove sa izabranim pravcem. Energija svakog stanja zavisi od veličine projekcije vektora $\vec{j}$ na pravac spoljašnjeg magnetnog polja $\vec{B}_0$.

jednaka je nuli, a energijski nivo je $(2j + 1)$ – put degenerisan. Magnetno polje, međutim, uklanja degeneraciju, pa se prvobitni $(2j + 1)$ – put degenerisani nivo cepa na $2j + 1$ jednako razmaknutih energijskih nivoa.



Slika 6.1.6 Zavisnost energije ukupnog ugaonog momenta od magnetnog polja: a) van polja magnetna energija svih $2j + 1$ stanja jednaka je nuli; b) magnetno polje uklanja degeneraciju. Stanja sa različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja m_j imaju različite energije. Energija je proporcionalna magnetnom kvantnom broju m_j i magnetnoj indukciji, B_0.

Jako magnetno polje, $U_{m,j} \ll U_{l,s}$

Ovde magnetno polje smatramo jakim ako je energija njegovog međudejstva sa orbitnim magnetnim momentom $\vec{\mu}_l$ i sa spinskim magnetnim momentom $\vec{\mu}_s$

mnogo veća od energije spin-orbitnog međudejstva. Tada je frekvencija kojom ugaoni momenti $\vec{l}$ i $\vec{s}$ precesuju oko spoljašnjeg magnetnog polja indukcije $\vec{B}_0$ mnogo veća od njihove precesione frekvencije oko vektora ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$. Zato što preovlađuje međudejstvo sa spoljašnjim magnetnim poljem, vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ počinju da precesuju oko njega. Kako su precesione frekvencije vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$ različite [jednačine (6.1.1) i (6.1.4)], to se i (prvobitno stalni) ugao koji oni međusobno zaklapaju neprekidno menja. Promena ugla, zapravo, označava promenljivi položaj vektora $\vec{l}$ u odnosu na $\vec{s}$ što za posledicu ima promenljivost vektora $\vec{j}$. Vektor ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$ nije više konstanta, te ni kvantni brojevi j i m_j nisu više dobri kvantni brojevi. Dakle, jako magnetno polje izaziva **rasprezanje** prvobitno spregnutih vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$. Raspregnuti vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$ u magnetnom polju ponašaju se kao slobodni vektori čije smo osobine opisali u odeljcima 6.1.1 i 6.1.2.

Na Slici 6.1.7 šematski su prikazane osobine ukupnog ugaonog momenta u jakom magnetnom polju. Pošto vektori $\vec{l}$ i $\vec{s}$, na koje se rasprezanjem raspao prvobitni vektor ugaonog momenta $\vec{j}$, precesuju nezavisno sopstvenim frekvencijama, to su i sve njihove osobine nezavisne. Tada se osobine sistema kao celine dobijaju sabiranjem osobina pojedinačnih momenata. Tako je energija magnetnog međudejstva zbir orbitne (6.1.2), i spinske (6.1.5), magnetne energije:

$$U_{m,l,s} = U_{m,l} + U_{m,s} \tag{6.1.8a}$$

$$U_{m,l,s} = (m_l + g_s m_s)\mu_B B_0 . \tag{6.1.8b}$$

S ozbirom na to da je ukupan broj orbitnih stanja $2l + 1$ i da orbitna stanja mogu da se ostvaruju potpuno nezavisno od spinskih, ukupan broj stanja, $W_{l,s}$, u sistemu u kojem je došlo do rasprezanja vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$ iznosi:

$$W_{l,s} = (2l + 1)(2s + 1) \tag{6.1.9a}$$

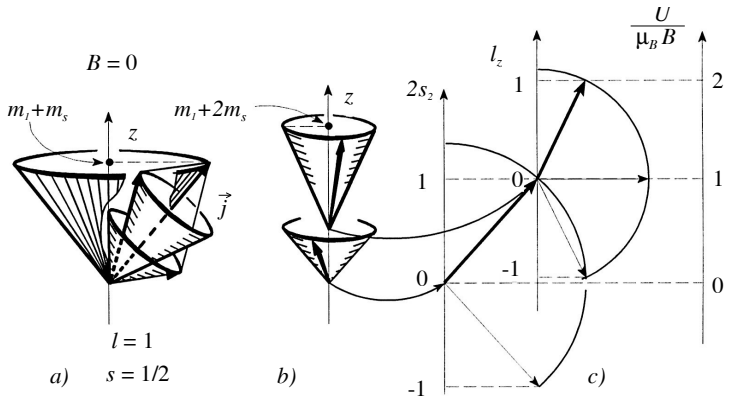
ili s obzirom na to da je za jednoelektronski sistem $s={}^1/_2$:

$$W_{l,s} = 2(2l + 1) \tag{6.1.9b}$$

što za $l = 1$ i $s = ½$ daje ukupno 6, a za $l = 2$ i $s = ½$ ukupno 10 stanja. Dakle, od $2j + 1$ prvobitnih spregnutih stanja pod uticajem jakog magnetnog polja u istom, jednoelektronskom sistemu dobijamo $2(2l + 1)$ raspregnutih stanja. Međutim, zbog činjenice da je $g_s \approx 2$ neka stanja imaju iste energije, što se lako pokazuje iz jednačine (6.1.8b). Pošto je $m_s = \pm ½$ i $g_s \approx 2$, to je $g_s m_s \approx \pm 1$, što zamenom u izrazu (6.1.8b) daje:

$$U_{m,l,s} = (m_l \pm 1)\mu_B B_0 . \tag{6.1.10}$$

Odavde vidimo da izraz u zagradi može da ima sve vrednosti od najveće $l + 1$ (kada je $m_l = l$) do najmanje $(-l - 1)$ (kada je $m_l = -l$), sa jediničnim priraštajem. Postoji



Slika 6.1.7 Ukupni ugaoni moment: a) van polja; b) u jakom magnetnom polju vektori orbitnog i spinskog ugaonog momenta prinuđeni su da precesuju oko spoljašnjeg polja zbog jakog međudejstva sa poljem. Precesione frekvencije su različite, zbog različitih žiromagnetnih odnosa, tako da se vektori u spoljašnjem polju praktično kreću nezavisno jedan od drugoga. Znači, jako spoljašnje polje raspreže vektore; c) energijsko stanje sistema kao celine dobija se slaganjem energijskih stanja orbitnog i spinskog momenta.

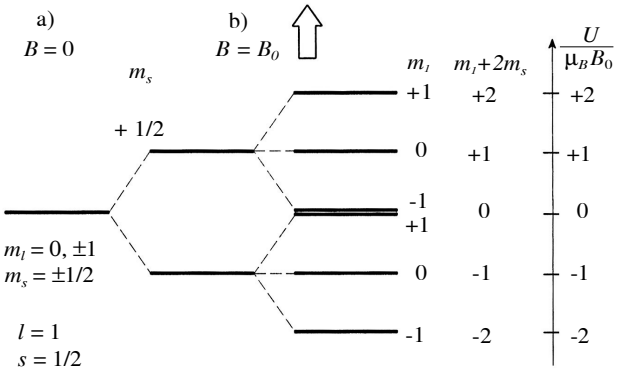
$l + 1$ energijskih stanja sa pozitivnim, i isto toliko energijskih stanja sa negativnim magnetnim kvantnim brojem. Dodamo li tome i jedinstveno energijsko stanje sa nultom energijom, nalazimo da je ukupan broj stanja sa različitim energijama, $W_{U,l,s}$:

$$W_{U,l,s} = 2(l + 1) + 1 = 2l + 3 . \tag{6.1.11}$$

Tako za $l = 1$ nalazimo pet stanja sa različitim energijama, za $l = 2$ sedam stanja. Razlika između ukupnog broja stanja (6.1.9b), i broja stanja sa različitim energijama (6.1.11), predstavlja broj onih energijskih stanja koja su čak i u jakom magnetnom polju dva puta degenerisana. Ovu degeneraciju lako je shvatiti iz jednačine (6.1.10), ako se uoči da se isto energijsko stanje postiže kvantnim brojevima m' i m'', ako je m'-1 = m''+ 1, odnosno $m' - m'' = 2$. Dakle, energijski nivo jednoelektronskog atoma degenerisan $(2j + 1)$ – puta u odsustvu polja, u jakom magnetnom polju u kojem dolazi do rasprezanja orbitnog i spinskog ugaonog momenta, cepa se na $2l + 3$ energijskih nivoa čije su energije izražene jednačinama (6.1.8) i (6.1.10).

Na Slici 6.1.8 šematski je prikazano cepanje ovih nivoa. Zbog nezavisnosti energije orbitnih i spinskih stanja (što je posledica rasprezanja odgovarajućih momenata jakim spoljašnjim magnetnim poljem) originalni $(2j + 1)$ – put degenerisani nivo prvo se cepa na $2s + 1$ spinskih podnivoa, a svaki od njih cepa se na $2l + 1$ orbitnih podnivoa. Pošto su cepanja spinskih i orbitnih podnivoa jednaka (u onoj aproksimaciji u kojoj je $g_s \approx 2$), to dolazi do pojave dvostruke degeneracije nekih podnivoa, tako da je ukupan broj različitih energijskih stanja manji od ukupnog broja nivoa koji se dobijaju posle rasprezanja vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$, izraz (6.1.11).

Na kraju, treba da se istakne da srednji slučaj $U_{m,j} \approx U_{l,s}$ ne može lako da se opiše pošto treba da se imaju u vidu dva konkurentska procesa, jednovremena precesija vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$ oko ukupnog ugaonog momenta $\vec{j}$ i oko spoljašnjeg magnetnog polja, $\vec{B}_0$.



Slika 6.1.8 Cepanje energijskih nivoa ukupnog ugaonog momenta u jakom magnetnom polju: a) van polja magnetna energija ukupnog ugaonog momenta jednaka je nuli (ovde zanemarujemo magnetnu energiju spin-orbitnog međudejstva). Energijski nivo je (2*j*+1)-put degenerisan; b) u jakom polju dolazi do rasprezanja vektora $\vec{l}$ i $\vec{s}$. Energijski nivo cepa se na 2*s*+1 spinskih podstanja, a svaki od ovih na novih 2*l*+1 orbitnih podstanja. Energija svakog tako nastalog stanja, pored magnetne indukcije spoljašnjeg polja B_0 zavisi i od veličine zbira projekcija pojedinih momenata na odabrani pravac, koji se opisuje izrazom $m_l + g_s m_s$ ili ako se uzme da je $g_s \approx 2$, $m_l + 2\, m_s$.

6.2 ŠTERN-GERLAHOV OGLED

DODATAK 6.2

D-6.2.1 Dipol u nehomogenom polju

Ponašanje dipola u homogenom polju, opisano u odeljku D-5.2.3, predstavlja poseban slučaj dipola u nehomogenom polju kada je nehomogenost polja jednaka nuli.

Nehomogenost polja izražavamo gradijentom polja, tj., promenom polja sa jediničnom promenom koordinata u izabranom pravcu. Gradijent se određuju samo za skalarna polja. Kod vektorskih polja gradijent se računa za njegovu (skalarnu) komponentu izabranu u proizvoljnom pravcu. Skalarna komponenta određuje se skalarnim proizvodom vektora polja i jediničnog vektora u pravcu u kojem se traži gradijent. Na primer, E_z komponenta polja $\vec{E}$ je $\vec{E} \cdot \vec{k}$, gde je $\vec{k}$ jedinični vektor u pravcu *z*-ose. Tada je gradijent polja $\vec{G}$, vektor određen izrazom:

$$\vec{G} = grad(\vec{E} \cdot \vec{k}) = \vec{\nabla} E_z \qquad \text{(D-6.2.1a)}$$
$$= \left(\frac{\partial E_z}{\partial x}\right)\vec{i} + \left(\frac{\partial E_z}{\partial y}\right)\vec{j} + \left(\frac{\partial E_z}{\partial z}\right)\vec{k}\ .$$

Vektori $\vec{i}, \vec{j}$ i $\vec{k}$ su jedinični vektori, redom u pravcu ose *x, y* i *z*. Gradijent skalarnog polja je vektor koji može da ima proizvoljni pravac. Mi ćemo da posmatramo najjednostavniji slučaj, prikazan na Slici D-6.2.1, gde se polje menja samo u pravcu koordinate *z* i to linearno. Dakle, posmatramo poseban slučaj kada i polje $\vec{E}$ i njegov gradijent $\vec{G}$ deluju u pravcu *z*-ose:

$$\vec{E} = E_z\vec{k},\ \vec{G} = G_z\vec{k}.$$

Tada je:

$$\left(\frac{\partial E_z}{\partial x}\right)\vec{i} = \left(\frac{\partial E_z}{\partial y}\right)\vec{j} = 0, \left(\frac{\partial E_z}{\partial z}\right)\vec{k} = const. \qquad \text{(D-6.2.1b)}$$

$$\vec{G} = grad\left(\vec{E}\cdot\vec{k}\right) = \vec{\nabla}E_z = \left(\frac{\partial E_z}{\partial z}\right)\vec{k} = G_z\vec{k}.$$

Pri stalnom gradijentu, izraz (D-6.2.1b) važi i kada se od beskonačno malog diferencijalnog priraštaja pređe na konačne priraštaje, pa dobijamo:

$$G_z\vec{k} = \frac{\Delta E_z}{\Delta z}\vec{k}$$

odnosno:

$$\Delta\vec{E} = \Delta E_z\vec{k} = G_z\Delta z\vec{k}. \qquad \text{(D-6.2.2)}$$

Koristeći iste dokaze kao i u odeljku D-5.2.3, za slučaj prikazan na Slici D-6.2.1 nalazimo da na pozitivno naelektrisanje $+q$ krutog dipola sa postojanim dipolnim momentom $\vec{\mu}$:

(D–5.2.8) $$\vec{\mu} = q\vec{r} \qquad \text{(D-6.2.3)}$$

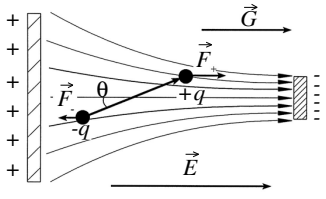
($\vec{r}$ je rastojanje između tačkastih naelektrisanja) deluje sila $\vec{F}_+$:

$$\vec{F}_+ = +q\vec{E}_+ \qquad \text{(D-6.2.4a)}$$

a na negativno naelektrisanje $-q$ sila $\vec{F}_-$:

$$\vec{F}_- = -q\vec{E}_-. \qquad \text{(D-6.2.4b)}$$

Zbog nehomogenosti polja, električna polja na koordinatama pozitivnog i negativnog naelektrisanja nisu jednaka, $\vec{E}_+ \neq \vec{E}_-$, ili tačnije $\vec{E}_+ > \vec{E}_-$.



Slika D-6.2.1 Dipol u nehomogenom magnetnom polju. Pored momenta sprega na dipol deluje i sila koja dipolu saopštava ubrzanje u pravcu gradijenta polja.

Ukupna sila koja deluje na postojani dipol jednaka je vektorskom zbiru sila $\vec{F}_+$ i $\vec{F}_-$:

$$\vec{F} = \vec{F}_+ + \vec{F}_- \qquad \text{(D-6.2.5a)}$$

odakle, s obzirom na izraz (D-6.2.4), nalazimo:

$$\vec{F} = \ + q\vec{E}_+ - q\vec{E}_- = q(\vec{E}_+ - \vec{E}_-) \ = \ q\Delta\vec{E} \qquad \text{(D-6.2.5b)}$$

gde $\Delta\vec{E}$ predstavlja razliku polja na koordinatama pozitivnog i negativnog naelektrisanja. Ako $\Delta\vec{E}$ zamenimo gradijentom polja prema izrazu (D-6.2.2), nalazimo da na dipol, pored momenta $\vec{T}$, deluje i sila:

$$\vec{F} = qG_z\Delta z\vec{k} \qquad \text{(D-6.2.6a)}$$

gde je Δz rastojanje između naelektrisanja dipola mereno duž z-ose. Sa Slike D-6.2.1 je očigledno da je:

$$\Delta z = |\vec{r}|\cos\theta$$

što zamenom u (D-6.2.6) daje:

$$\vec{F} = qG_z|\vec{r}|\cos\theta\vec{k}\,. \qquad \text{(D-6.2.6b)}$$

Ako uzmemo u obzir jednačinu (D-6.2.3), nalazimo da je:

$$\vec{F} = \mu G_z\cos\theta\vec{k} \qquad \text{(D-6.2.6c)}$$

odnosno:

$$\vec{F} = \mu_z G_z\vec{k}\,. \qquad \text{(D-6.2.6d)}$$

Najzad, budući da sila deluje u pravcu z-ose, poslednji izraz možemo da napišemo u skalarnom obliku:

$$F_z = \mu_z G_z\,. \qquad \text{(D-6.2.6e)}$$

Dakle, u linearno nehomogenom polju, na dipol, pored momenta sprega, deluje i rezultujuća sila koja je proporcionalna gradijentu polja i projekciji momenta na pravac gradijenta. To znači da u nehomogenom polju, pored rotacije dipola, dolazi i do njegovog pomeranja u smeru gradijenta polja.

Osobine magnetnog dipola (magnetnog momenta) u nehomogenom magnetnom polju dobijaju se neposredno iz razmatranja iznetih za električni dipol u električnom polju. Sila, F_z, koja deluje na magnetni moment, $\vec{\mu}$, u gradijentu magnetnog polja, G_z, proporcionalna je gradijentu i projekciji momenta na pravac gradijenta, jednačina (D-6.2.6e).

Isti izraz lako može da se dobije formalnim putem ako imamo na umu da je sila potencijalnog polja, $\vec{F}$, jednaka negativnom gradijentu njegovog potencijala, U:

$$\vec{F} = -grad(U) = -\vec{\nabla}U\,. \qquad \text{(D-6.2.7a)}$$

Pošto je:

(D-5.2.13a) $$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

iz izraza (D-6.2.7a) nalazimo:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}(-\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \tag{D-6.2.7b}$$

$$\vec{F} = + \left[\frac{\partial(\vec{\mu} \cdot \vec{B})}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial(\vec{\mu} \cdot \vec{B})}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial(\vec{\mu} \cdot \vec{B})}{\partial z}\vec{k} \right]. \tag{D-6.2.7c}$$

Ako opštu jednačinu (D-6.2.7c) primenimo na ovaj slučaj koji nas zanima, tj. na postojani dipol u jednodimenzionom stalnom gradijentu:

$$|\vec{\mu}| = const.,\ B_x = B_y = 0,\ B = B_z\vec{k}$$
$$\frac{\partial B_z}{\partial x} = \frac{\partial B_z}{\partial y} = 0\ ,\ \frac{\partial B_z}{\partial z} = const.$$

neposredno dobijamo:

$$\vec{F} = \vec{\mu} \cdot \vec{k} \left(\frac{\partial B_z}{\partial z} \right) \tag{D-6.2.7d}$$

odnosno:

$$F_z = \mu_z \left(\frac{\partial B_z}{\partial z} \right). \tag{D-6.2.7e}$$

Dakle, kao i ranije nalazimo da je sila koja deluje na dipol u gradijentu polja proporcionalna gradijentu i projekciji dipola na pravac gradijenta.

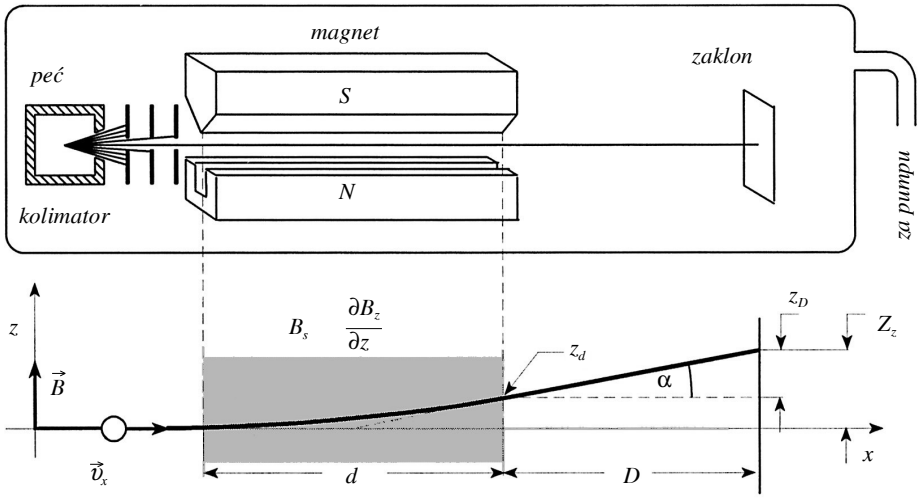
Kako je već pomenuto, Štern-Gerlahov eksperiment postavljen je i izveden sa jedinim ciljem da se proveri hipoteza o prostornom kvantovanju ugaonih momenta pojedinačnih, neutralnih, atoma u magnetnom polju. S tim ciljem, snop atoma srebra propuštan je kroz nehomogeno magnetno polje čiji je gradijent paralelan sa pravcem delovanja polja. Magnetno polje ima dvostruku ulogu: da odredi pravac duž kojeg se ispituje kvantovanje ugaonog momenta, i da gradijentom izazove skretanje atoma sa prvobitnog pravca, saglasno jednačini (D-6.2.7e).

6.2.1 Opis ogleda

Uređaj koji su Štern i Gerlah koristili prikazan je šematski na Slici 6.2.1. Uređaj se nalazi u visokom vakuumu da bi se obezbedilo da slobodni atomi srebra, koji se oslobađaju iz peći, celu putanju do zaklona na kojem se registruju, prelaze bez sudara sa molekulima vazduha. Na atmosferskom pritisku srednji slobodni put atoma je oko 10^{-4} cm. Da bi se srednji slobodni put učinio dužim od rastojanja između peći i zaklona, približno 1–2 m, pritisak u uređaju mora da bude manji od 10^{-8} atmosfera. Neutralni atomi srebra nakon izletanja iz peći usmeravaju se, prave snop,

i posle prolaska kroz magnet padaju na zaklon. Kada magnetno polje nije uključeno, na zaklonu se vremenom pojavljuje lik upadnog snopa od nataloženih atoma srebra. Pošto se kolimator sastoji od niza proreza, lik na ekranu se javlja u vidu tanke horizontalne linije.

Snop atoma srebra pada normalno na pravac magnetnog polja, Slika 6.2.1a. Magnet kroz koji snop prolazi napravljen je tako da je gradijent polja najveći u pravcu z-ose, a zanemarljivo mali u pravcu x-ose i y-ose, Slika 6.2.1b. I pravac magnetne indukcije poklapa se sa z-osom. Zbog toga, kada se polje uključi, na svaki atom deluje sila F_z koja je normalna na pravac kretanja atoma. Posle izlaska iz magnetnog polja skrenuti atomi nastavljaju da se kreću pravolinijski do zaklona.



Slika 6.2.1 Štern – Gerlahov ogled: (gore) šema uređaja; (dole) putanja neutralnog atoma u uređaju.

Kao što se vidi sa Slike 6.2.1b, geometrija kretanja neutralnih atoma vrlo je slična slučaju koji je opisan u odeljku 2.2.4, gde je razmatrano kretanje elektrona u poprečnom (transverzalnom) električnom polju. Dakle, neutralni atom stalnom brzinom, υ_x, uleće u gradijent magnetnog polja $(\partial B/\partial z)\vec{k}$, gde na putu d_m ($d_m \approx$ 10-50 cm) na njega deluje sila F_z:

(D-6.2.7e)
$$F_z = \mu_z\left(\frac{\partial B}{\partial z}\right). \tag{6.2.1}$$

Ovde je μ_z projekcija magnetnog momenta atoma na pravac spoljašnjeg polja i z-osu. Nakon izlaska iz magneta atom se kreće pravolinijski i prevalivši put D ($D \approx$ 50–100 cm) pada na zaklon. Otklon atoma na zaklonu Z_z, meren u odnosu na položaj u kojem atomi padaju kada nema polja, neposredno se meri. Ovaj otklon možemo da povežemo sa parametrima uređaja, razmatranjem koje je slično onom iznetom u odeljku 2.2.4.

Dakle, atom se kreće stalnom brzinom, υ_x, koja, zbog prilično malog skretanja, može da se smatra stalnom tokom celog ogleda. Na putu d_m, na atom deluje stalna sila F_z, pa je uvek:

$$\upsilon_x = const., \ \upsilon_y = 0, \tag{6.2.2}$$

a pri $t = 0$:

$$\upsilon_z(0) = 0 \text{ i } z(0) = 0.$$

Ukupno vreme, t_d, koje atom provede u magnetnom polju, možemo da izrazimo preko početne brzine atoma υ_x i dužine zone d_m, u kojoj polje deluje:

$$\upsilon_x = \frac{d_m}{t_d}, \ t_d = \frac{d_m}{\upsilon_x}. \tag{6.2.3}$$

Jednačinu kretanja atoma u magnetnom polju nalazimo iz II Njutnovog zakona:

(D-2.2.1c)
$$F_z = m_A \frac{d^2 z}{dt^2} \tag{6.2.4}$$

gde je m_A masa atoma. Preuređivanjem nalazimo:

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{F_z}{m_A}. \tag{6.2.5}$$

Cilj nam je da veličinu koju tražimo, a koju ne možemo neposredno da merimo (što se odnosi na skoro sve atomske veličine), dovedemo u vezu sa veličinama koje merimo i koje instrumentalnim parametrima možemo da zadajemo. U ovom slučaju, projekciju magnetnog momenta atoma na pravac magnetnog polja μ_z, želimo da povežemo sa otklonom snopa na ekranu koji neposredno merimo i sa parametrima uređaja [dimenzijama uređaja D i magnetnog polja d_m, sa veličnom gradijenta, $(\partial B/\partial z)$, itd.].

S obzirom na to da su F_z i m_A konstante, izraz (6.2.5) može da se neposredno integrali, pa dobijamo:

$$\frac{dz}{dt} = \upsilon_z = \frac{F_z}{m_A} t + C_1 \tag{6.2.6}$$

a ponovljenim integraljenjem:

$$z = \frac{1}{2}\frac{F_z}{m_A} t^2 + C_1 t + C_2. \tag{6.2.7}$$

Jednačina kretanja (6.2.5) važi samo za područje u kojem na atom deluje magnetno polje, što znači da može da se integrali u vremenskom intervalu od $t = 0$ do $t = t_d$.

Zamenom početnih uslova (6.2.2) u izraze (6.2.6) i (6.2.7), nalazimo da je $C_1 = C_2 = 0$ i da z-otklon atoma posle vremena t_d iznosi:

$$z_d = \frac{1}{2}\frac{F_z}{m_A}t_d^2. \tag{6.2.8a}$$

Najzad, oslobađajući se vremena t_d pomoću izraza (6.2.3), nalazimo otklon atoma na izlasku iz magnetnog polja:

$$z_d = \frac{1}{2}\frac{F_z}{m_A}\frac{d_m^2}{\upsilon_x^2}. \tag{6.2.8b}$$

Na isti način iz jednačine (6.2.6) nalazimo z-komponentu brzine koju atom dobija posle prolaska kroz gradijent polja:

$$(\upsilon_z)_d = \frac{F_z}{m_A}\frac{d_m}{\upsilon_x}. \tag{6.2.9}$$

U području D atom se kreće pravolinijski, pod uglom α u odnosu na pravac upadnog snopa. Ugao skretanja α (koji je veoma, veoma, mali) određen je odnosom brzina $(\upsilon_z)_d$ i υ_x:

$$tg\alpha = \frac{(\upsilon_z)_d}{\upsilon_x} = \frac{F_z d_m}{m_A \upsilon_x^2}. \tag{6.2.10}$$

Ugao skretanja α može da se odredi i iz geometrijskih odnosa. Sa Slike 6.2.1b vidimo da je:

$$tg\alpha = \frac{z_D}{D}$$

odakle nalazimo:

$$z_D = Dtg\alpha \tag{6.2.11a}$$

a zamenom $tg\alpha$ iz (6.2.10):

$$z_D = \frac{F_z D d_m}{m_A \upsilon_x^2}. \tag{6.2.11b}$$

Skretanje atomskog snopa na ekranu Z_z, Slika 6.2.1b, jednako je zbiru otklona z_d i z_D. Sabiranjem jednačina (6.2.8b) i (6.2.11b) nalazimo:

$$Z_z = \frac{F_z d_m\left(D + \frac{1}{2}d_m\right)}{m_A \upsilon_x^2} \tag{6.2.12a}$$

a zamenom sile F_z iz (6.2.1):

$$Z_z = \frac{d_m\left(D + \frac{1}{2}d_m\right)}{m_A \upsilon_x^2}\left(\frac{\partial B}{\partial z}\right)\mu_z . \qquad (6.2.12b)$$

S obzirom na to da su parametri d_m, D, $(\partial B/\partial z)$, υ_x i m_A za date eksperimentalne uslove stalni, to izraz (5.4.12a) u sažetom obliku možemo da napišemo kao:

$$Z_z = K\mu_z . \qquad (6.2.12c).$$

Dakle, skretanje snopa neutralnih atoma u poprečnom magnetnom polju i poprečnom gradijentu proporcionalno je projekciji magnetnog momenta na pravac polja.

6.2.2 Tumačenje rezultata

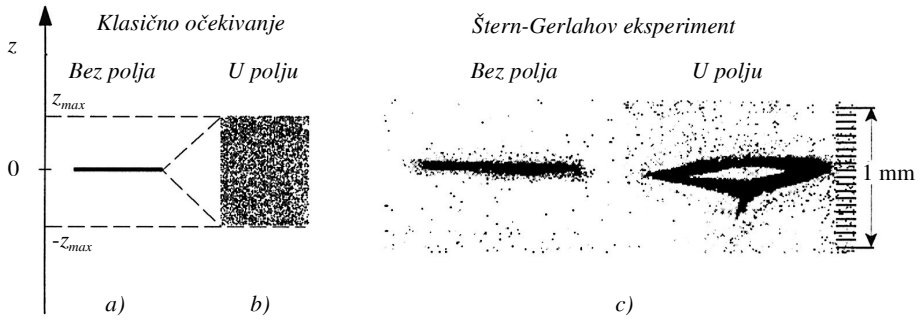
Iz jednačine (6.2.12c) sledi da je otklon snopa neutralnih atoma pod uticajem poprečnog magnetnog polja i njegovog gradijenta proporcionalan projekciji magnetnog momenta atoma na pravac polja. Po klasičnoj teoriji, magnetni momenti su haotično usmereni u prostoru. To znači da mogu da imaju proizvoljne smerove u odnosu na izabrani pravac. U magnetnom polju momenti se usmeravaju u pravcu polja ali zato što nema nikakvih ograničenja, projekcija momenta na pravac polja μ_z može da ima vrednost od 0 do $\pm (\mu_z)_{max}$. Zbog toga bi, prema klasičnim očekivanjima, i otklon atoma na zaklonu mogao da ima neprekidno raspodeljene vrednosti od 0 do $\pm (Z_z)_{max}$, kao što je šematski prikazano na Slici 6.2.2b. Međutim, za neutralni snop atoma srebra, Štern i Gerlah su dobili na zaklonu dva diskretna traga, Slika 6.2.2c. Iz toga neposredno sledi da μ_z kod atoma srebra može da ima samo dve diskretne vrednosti. Štern-Gerlahov ogled izveden je i na drugim neutralnim atomima: H, Li, Na, K, Cs, V, Mn, Fe, Hg, Mg, ... I kad god je bilo otklona, cepanje originalnog snopa bilo je **diskretno**. Pri tome je opaženo da kod atoma H, Li, Na, K, Cs i Ag snop ostavlja dva traga, kao na Slici 6.2.2c, kod atoma vanadijuma četiri, kod mangana šest, kod gvožđa 9, itd. Isto tako bilo je uočeno to da postoje atomi na čiji snop magnetno polje uopšte ne utiče (Hg, Mg). Činjenica da snop skreće, predstavlja neposredni dokaz za postojanje magnetnog momenta kod slobodnog neutralnog atoma, a diskretna priroda skretanja pruža dokaz o postojanju prostornog kvantovanja.

Kvalitativno objašnjenje Štern-Gerlahovog ogleda može da se dobije i iz Bor-Zomerfeldove teorije u kojoj je jasno iskazano prostorno kvantovanje ugaonih momenata. Međutim, Bor-Zomerfeldova teorija nailazi na teškoće već prilikom tumačenja broja komponenata na koje se cepa originalni snop. Na primer, za atom vodonika kod kojeg je u osnovnom stanju $n_\varphi = 1$, očekuje se cepanje snopa na tri komponente (m = -1, 0, +1). Eksperimentalno su, međutim, opažene samo dve. Iz toga neposredno sledi da u osnovnom stanju vodonika n_φ mora da bude manje od 1, dakle 0, a otuda sledi da elektron poseduje sopstveni magnetni moment. (Istorijski gledano, ovakav zaključak iz Štern-Gerlahovog ogleda izvučen je tek nekoliko godina kasnije kada su Ulenbek i Gudsmit postulirali spin elektrona, pošavši od sasvim drugih činjenica.)

Sve posledice Štern-Gerlahovog ogleda lako mogu da se objasne na osnovu razmatranja koja su izneta u prethodnom odeljku u okviru vektorskog modela atoma. Atomi koji uopšte ne skreću u gradijentu magnetnog polja (Hg, Mg, ...) u osnovnom stanju **nemaju** magnetni moment. To znači da imaju paran broj elektrona i da elektroni obrazuju zatvorene elektronske ljuske u kojima su orbitni i spinski momenti uzajamnim delovanjem poništeni. Zbog toga, ukupni atomski momenti, magnetni i ugaoni, potiču od jednog ili više elektrona koji se u atomu nalaze van zatvorenih ljuski. Pošto se najveći broj izvedenih eksperimenata odnosi na atome koji imaju jedan elektron u *s*-stanju, to ukupnom atomskom magnetnom momentu doprinos daje samo spinski magnetni moment tog elektrona. U spoljašnjem magnetnom polju ovaj moment može da zauzme jedno od dva moguća stanja, $m_s = +1/2$ i $m_s = -1/2$. U svakom od tih stanja atom precesuje jednom te istom Larmorovom frekvencijom ali ima različite projekcije na pravac magnetnog polja, u prvom slučaju pozitivnu, a u drugom negativnu. Zbog vrlo male verovatnoće, spontani prelaz iz jednog m_s stanja u drugo praktično se ne odigrava, tako da je približno jedna polovina atomskih momenata usmerena paralelno, a druga antiparelelno polju. Pod uticajem gradijenta polja na usmerene magnetne momente deluje sila F_z. Sila je istog intenziteta za oba m_s stanja ali zbog suprotnih smerova magnetnih momenta, ta sila deluje u suprotnim smerovima. Zbog toga se pri dovoljno velikom gradijentu originalni snop cepa i deli na dva simetrična snopa. Mereći rastojanja između tragova koje ostavljaju atomi na ekranu i znajući ostale instrumentalne parametre, Štern i Gerlah su mogli da sa greškom od ± 10% izmere apsolutnu vrednost magnetnog momenta mnogih atoma. Za one atome čiji se snop cepa na dva, našli su da je μ_z vrlo blizu vrednosti Borovog magnetona μ_B, jednačina (5.1.9).

Iz opisanog Štern-Gerlahovog ogleda i drugih sličnih merenja može da se zaključi sledeće:

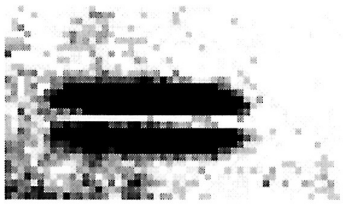
a) Postoji **prostorno kvantovanje** magnetnih (i njima pridruženih ugaonih) momenata. Magnetni (ugaoni) momenti u magnetnom polju indukcije B_0 mogu da se orijentišu samo pod određenim uglovima;



Slika 6.2.2 Otklon neutralnog snopa atoma srebra u Štern-Gerlahovom ogledu: a) u odsustvu polja nema otklona; b) po klasičnoj teoriji očekuje se ravnomerno raspršivanje snopa u intervalu $\pm (Z_z)_{max}$; c) originalni rezultat Štern-Gerlahovog eksperimenta. Snop atoma srebra propuštan je dovoljno dugo da se stvori vidljiva naslaga srebra na staklenoj ploči. U magnetnom polju snop se cepa na dve komponente. Cepanje je jasno izraženo samo u sredini snopa gde je gradijent polja najveći.

b) Iz kvantitativnog razmatranja opaženog cepanja snopa neutralnih atoma srebra nađeno je da je $\mu_z = \pm\mu_B$. U opštem slučaju, ako je veličina gradijenta polja poznata ovom metodom mogu neposredno da se mere magnetni momenti atoma;

c) Za atome koji imaju najdalji (valentni) elektron u *s*-stanju (H, Li, Na, K, Cs, Ag, ...) dobija se ista vrednost za silu skretanja, odakle sledi da se **ugaoni momenti svih unutrašnjih elektrona uzajamno poništavaju,** tako da se eskperimentalno opaža samo uticaj poslednjeg *s*-elektrona;



Slika 6.2.3 Cepanje snopa litijumovih atoma u magnetnom polju po metodi Šterna i Gerlaha. Snop ostavlja dva traga pošto je litijumov term u osnovnom stanju $^2S_{1/2}$ [jedan valentni elektron u *s* orbiti ($l = 0$) sa spinskim momentom 1/2]. Iz rastojanja između tragova može da se odredi veličina magnetnog momenta. Na taj način Gerlah je uspeo da dokaže da je magnetni spinski moment jednak Borovom magnetonu.

d) Elektron u *s*-stanju ima orbitni ugaoni moment $l = 0$ i njegov moment potiče samo od elektronskog spina;

e) Kao i kod žiroskopa, veličina i pravac ugaonog momenta atoma ostaju očuvani za vreme njegovog kretanja kroz prostor.

Na kraju, treba da se istakne da je Štern-Gerlahov eksperiment dao osnovu za predstave o ugaonim i magnetnim momentima atoma, koje su izložene u odeljcima 5.1 i 5.2.

6.3 ZEMANOV EFEKT

Zemanov efekt (Piter Zeeman, 1865–1943), je pojava cepanja spektralnih linija, na više komponenata kada se atomi koji ih emituju nađu u magnetnom polju. Dva Zemanova efekta, normalni i anomalni, dobili su imena prema tome da li su ili ne mogli da se objasne klasičnim predstavama. Normalni Zemanov efekt objasnio je Lorenc (Hendrik Antoon Lorentz, 1853–1928) klasičnom elektronskom teorijom, dok je za objašnjenje anomalnog efekta trebalo sačekati razvoj kvantne mehanike. Ovde ćemo detaljno da razmotrimo oba efekta. Videćemo da je anomalni efekt zapravo normalnija pojava od normalnog. Isto tako, videćemo da normalni efekt predstavlja samo poseban slučaj anomalnog Zemanovog efekta.

DODATAK 6.3

D-6.3.1 Zračenje Hercovog dipola

Prema klasičnom shvatanju, svako naelektrisanje pri ubrzanom kretanju emituje elektromagnetne talase. Najočigledniji primer predstavlja zakočno zračenje, odeljak 7.2, koje nastaje kao posledica usporavanja elektrona na metalnoj meti.

Najjednostavniji izvor koherentnog elektromagnetnog zračenja, dakle zračenja sa dobro određenom frekvencijom i fazom, predstavlja električni dipol koji se sastoji od dva jednaka naelektrisanja, suprotnog znaka, koja linearno harmonijski osciluju. Ovaj slučaj dipola koji zrači prvi je opisao Hajnrih Herc (Heinrich Hertz) koristeći Maksvelovu elektromagnetnu teoriju, pa se zbog toga naziva Hercov dipol. Ako naelektrisanja imaju jednake mase, njihovi otkloni su jednaki i u suprotnim smerovima u odnosu na centar mase. Međutim, ako mase naelektrisanja nisu jednake, masivnija čestica ima manju amplitudu oscilovanja u

odnosu na zajednički centar mase. Kada je masa lakše čestice zanemarljiva u odnosu na masu teže, masivna čestica je praktično nepokretna. Tada su oscilacije dipola posledica kretanja samo lakše čestice. Ovaj slučaj je veoma važan za opisivanje zračenja atomskih sistema pošto masivno atomsko jezgro može da se smatra praktično nepomičnim. Atomski oscilujući dipol, po klasičnom shvatanju, javlja se kao posledica oscilatornog kretanja elektrona u atomu.

Šematski prikaz Hercovog dipola dat je na Slici D-6.3.1. Postavimo koordinatni sistem u centar mase dipola, sa *z*-osom koja je paralelna osi dipola. Tada zračenje dipola u proizvoljnoj izabranoj tački određenoj vektorom $\vec{r}$ možemo da izrazimo bilo preko jačine električnog polja, elektromagnetnog talasa u toj tački $E\,(r,\,\theta\,,\,\varphi)$, bilo preko intenziteta zračenja $I\,(r,\,\theta\,,\,\varphi)$. Intenzitet zračenja proporcionalan je kvadratu polja, tj.:

$$I(r,\,\theta,\,\varphi) \propto E^2(r,\,\theta,\,\varphi)\ . \qquad \text{(D-6.3.1)}$$

Na ovom mestu razmatramo samo ugaonu zavisnost intenziteta dipolnog zračenja, pa rastojanje *r* kao promenljivu možemo da izostavimo, dakle, $E = E(\theta,\,\varphi)$. Zbog osne simetrije dipola i izotropije slobodnog prostora, očigledno je da intenzitet zračenja ne zavisi od koordinate φ, tako da se prostorna zavisnost emitovanog zračenja svodi na koordinatu θ .

Poznato je da su u izotropnoj sredini elektromagnetni talasi poprečni (transverzalni), tj., električno polje talasa je normalno na pravac njegovog prostiranja. Vektor električnog polja talasa proprocionalan je vektoru dipolnog momenta koji ga stvara. Dakle, poprečna komponenta električnog polja u proizvoljno izabranom pravcu $E(\theta)$, proporcionalna je projekciji vektora dipolnog momenta na ravan koja je normalna na pravac prostiranja talasa. Iz odnosa vektora dipolnog momenta, $\vec{\mu}_D$, i vektora položaja, $\vec{r}$, Slika D-6.3.1a, vidimo da je dipolno zračenje linearno polarizovano, a da je ravan polarizacije određena vektorima $\vec{\mu}_D$ i $\vec{r}$. Isto tako, sa slike je očigledno da je:

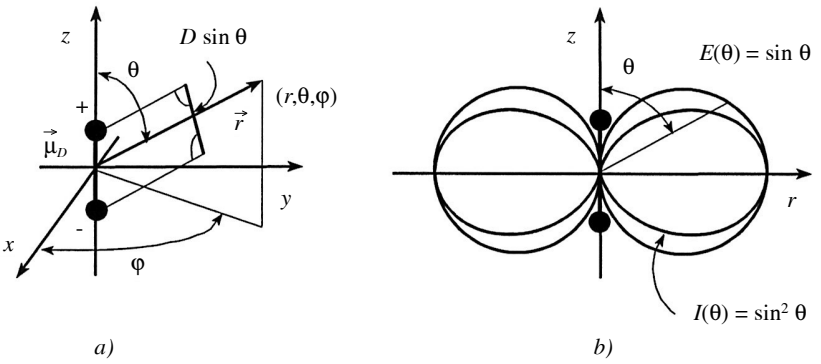
$$E(\theta) \propto \sin\theta \qquad \text{(D-6.3.2)}$$

a s obzirom na (D-6.3.1):

$$I(\theta) \propto \sin^2\theta. \qquad \text{(D-6.3.3)}$$

Ugaona zavisnost električnog polja emitovanog zračenja, $E(\theta)$, i intenziteta emitovanog zračenja, $I(\theta)$, jednačine (D-6.3.2) i (D-6.3.3), prikazana je na Slici D-6.3.1b. Sa slike, kao i iz odgovarajućih izraza, sledi da je intenzitet zračenja najveći u pravcu normalnom na oscilujući dipol, i što je za nas još važnije, dipol ne emituje zračenja u pravcu paralelnom svojoj osi.

Drugi, ovde važan izvor zračenja predstavlja naelektrisanje koje se kreće po kružnoj putanji, kao što je šematski prikazano na Slici D-6.3.2. Kao u prethodnom slučaju i ovde vektor električnog polja emitovanog zračenja mora da bude paralelan projekciji dipolnog momenta $\vec{\mu}_D$ na ravan koja je normalna na pravac prostiranja talasa. U ovom slučaju naelektrisanje dobija ubrzanje zbog rotacije postojanog dipola (a ne oscilacijama kao kod Hercovog dipola), pa komponenta električnog polja zračenja koje taj dipol emituje, takođe, rotira u ravni koja je normalna na pravac zračenja. To znači da je zračenje emitovano u pravcu *z*-ose, Slika D-6.3.2, cirkularno polarizovano, a u proizvoljno izabranom pravcu polarizacija je eliptična. Situacija postaje mnogo jasnija ako kružno kretanje naelektrisanja predstavimo kao slaganje dva međusobno normalna oscilujuća dipola koji su pomereni u fazi za 90°. Ose duž kojih kružno kretanje razlažemo na dva Hercova dipola, Slika D-6.3.2b, x', y', biramo tako da



Slika D-6.3.1 Zračenje Hercovog dipola: a) električni vektor emitovanog zračenja dobijamo projektovanjem dipolnog momenta na ravan koja je normalna na pravac prostiranja zračenja. U pravcu ose dipola ova projekcija je nula, dakle, u tom pravcu dipol ne zrači. Zračenje emitovano u drugim pravcima je linearno polarizovano pošto električni vektor emitovanog zračenja uvek leži u ravni koja prolazi kroz osu dipola; b) intenzitet emitovanog zračenja proporcionalan je kvadratu vektora električnog polja. Intenzitet je najveći u ravni normalnoj na osu dipola i u izotropnoj sredini ne zavisi od ugla φ.

jedna, recimo y', leži u ravni normalnoj na pravac u kojem posmatramo zračenje. Tada, na svaki dipol primenjujemo jednačine D-6.3.2 i D-6.3.3, pa nalazimo:

$$E_{x'}(\theta) \propto \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\theta$$

$$E_{y'} \propto \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad \text{(D-6.3.4)}$$

i:

$$I_{y'}(\theta) \propto \frac{1}{2}\cos^2\theta$$

$$I_{y'} \propto \frac{1}{2}. \qquad \text{(D-6.3.5)}$$

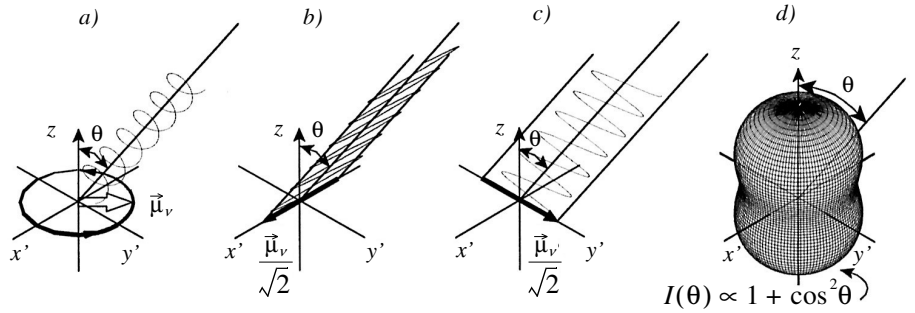
Ukupan intenzitet nalazimo sabiranjem intenziteta zračenja sa komponentni dipola:

$$I_{circ} = I_{x'} + I_{y'}$$

$$\text{(D-6.3.6)}$$

$$I_{circ} \propto \frac{1}{2}(1 + \cos^2\theta).$$

Iz dobijenih izraza zaključujemo da rotirajuće naelektrisanje emituje zračenje u svim pravcima i to najjače pri $\theta = 0°$. Tada je $E_{x'} = E_{y'}$ i zračenje je cirkularno polarizovano. Pri



Slika D-6.3.2 Zračenje rotirajućeg dipola: a) naelektrisanje u kružnom, dakle, ubrzanom kretanju, emituje zračenje čiji električni vektor, kao i kod Hercovog dipola, dobijamo projektovanjem dipolnog momenta na ravan koja je normalna na pravac prostiranja zračenja. U opštem slučaju ova projekcija menja se po položaju i po veličini, pa je zračenje eliptično polarizovano; b) intenzitet i polarizaciju zračenja određujemo tako što kružno kretanje razlažemo na dve ortogonalne, linearne komponente, u fazi pomerene za 90°. U pravcu *z*-ose intenzitet projekcije se ne menja – emitovano zračenje je cirkularno polarizovano; c) u pravcu normalnom na *z*-osu projekcija je neprekidno u ravni rotacije dipola i emitovano zračenje je linearno polarizovano; d) prema izrazu (D-6.3.6) intenzitet zračenja najveći je u pravcu *z*-ose, a najmanji normalno na nju.

$\theta = 90°$ pošto je $E_{x'} = 0$ zračenje je najslabije i linearno polarizovano. Ravan polarizacije i ravan rotacije naelektrisanja koje zrači, su paralelne. Zračenje emitovano pod proizvoljnim uglom θ, je eliptički polarizovano. Zavisnost njegovog intenziteta od ugla θ određena je izrazom (D-6.3.6), a grafički je prikazana na Slici D-6.3.2.

Kao što zračenje naelektrisanja koje kruži formalno možemo da opišemo kao slaganje zračenja dva međusobno normalna Hercova dipola, tako i Hercov dipol možemo da predstavimo kao slaganje dva rotirajuća naelektrisanja koja kruže istom frekvencijom u suprotnim smerovima. Ovaj formalizam je zgodan zbog toga što zračenje proizvoljno usmerenog Hercovog dipola možemo da predstavimo kao slaganje zračenja Hercovog dipola paralelnog *z*-osi i dva rotirajuća dipola koji kruže u suprotnim smerovima. Ako osa rotacije dipola prolazi kroz jedno od njegovih naelektrisanja (kao recimo kod atoma gde negativni elektroni „kruže" oko masivnog pozitivnog jezgra), tada je svejedno da li posmatramo rotirajući dipol ili rotirajuće naelektrisanje. Naelektrisanje koje nije u pokretu, ne utiče na emitovano zračenje.

D-6.3.2 Ugaoni moment fotona

U klasičnoj teoriji svetlosti polarizacija zračenja može da se objasni preko osobina električnog vektora elektromagnetnog talasa. Ako je ovaj vektor neprekidno u jednoj ravni, tada je talas linearno polarizovan. Ako vektor rotira u ravni koja je normalna na pravac prostiranja zračenja, tada je reč o (levo ili desno) cirkularno polarizovanom talasu. Eliptična polarizacija, leva ili desna, predstavlja najopštiji slučaj gde se kod električnog vektora zračenja menja i ugao i intenzitet.

U korpuskularnoj teoriji svetlosti, kada kao nosioce elektromagnetne energije posmatramo fotone, sve pojave, uključujući i polarizaciju, možemo da objasnimo odgovarajućim osobinama fotona. Na primer, frekvenciji svetlosti (talasnoj dužini) pridružuje se mehanički moment fotona.

Kako smo već pomenuli u odeljku 4.6.5, foton pored impulsa (mehaničkog momenta) ima i ugaoni moment, spin, koji iznosi + $\hbar$ ili - $\hbar$. Na osnovu sličnosti sa drugim kvantnim objektima gde se veličina ugaonog momenta menja za 1 x $\hbar$, očekivalo bi se da postoji i foton sa nultim ugaonim momentom. Kako to ne postoji, ovde smo ponovo došli u situaciju u kojoj

smo bili i nekoliko puta ranije, da svako korišćenje analogije, kad-tad nailazi na prepreku zbog koje ne može da se dosledno primeni na sve pojave. U ovom slučaju, sličnost fotona sa drugim česticama u pogledu spina ne može da se sprovede do kraja zbog relativističke prirode fotona. Naime, foton za razliku od drugih čestica nema masu mirovanja, kreće se brzinom svetlosti, pa otuda ne može u svemu da bude sličan drugim česticama sa konačnom masom mirovanja.

Spin fotona, dakle njegov ugaoni moment, može da se dovede u vezu sa cirkularnom polarizacijom svetlosti, za šta postoje i neposredni eksperimentalni dokazi. Ako crno telo (apsorber) apsorbuje (upija) cirkularno polarizovano zračenje, tada pored energije, apsorber od prispelih fotona dobija i obrtni mehanički moment. Mada je ovaj uticaj izuzetno mali, Bet (R. A. Beth) ga je eksperimentalno opazio 1936. godine. Iz Betovog eksperimenta neposredno sledi da dva spinska stanja fotona + $\hbar$ ili - $\hbar$ i - $\hbar$ mogu da se povežu sa dva smera cirkularne polarizacije svetlosti. Pošto, prema relativističkoj teoriji, ne može da postoji kretanje normalno na pravac prostiranja fotona, polarizacija fotona, spin, objašnjava se ugaonim momentom koji je paralelan ili antiparalelan smeru prostiranja svetlosti. Obično se uzima da *L*-polarizovani fotoni imaju ugaoni moment + $\hbar$ (u istom smeru sa smerom njihovog kretanja), a *D*-polarizovani fotoni - $\hbar$ (u suprotnom smeru od smera kretanja). Normalno, postavlja se pitanje šta je sa linearno polarizovanim zracima koji bi odgovarali fotonima sa nultim ugaonim momentom. Slučaj linearne polarizacije objašnjava se, kao i kod elektromagnetnih talasa, slaganjem *L* i *D* polarizovanih stanja.

Detaljni opis polarizacije fotona ovde se iznosi u vezi sa pravilima izbora, koja su podrobnije razmotrena u odeljku 9.3, a koja su veoma važna za objašnjenje Zemanovog efekta. S jednim od ključnih pravila izbora, $\Delta l = \pm 1$, susreli smo se još u odeljku 4.6.5. Ovo pravilo posledica je zakona o održanju ugaonog momenta. Za svaki sistem, pa i za atom koji zrači, ugaoni moment mora da bude stalan, tj., $\Sigma \vec{l}_i = const.$ Pošto foton sa sobom odnosi ugaoni moment $\pm\hbar$, to i atom, koji ga emituje mora u odgovarajućem iznosu da promeni sopstveni ugaoni moment.

Kako smo videli u prethodnom odeljku, D-6.3.1, cirkularno polarizovani foton emituje se samo u pravcu *z*-ose. Isto tako, cirkularno polarizovani foton ima ugaoni moment $\pm\hbar$ koji je, zavisno od smera polarizacije, paralelan ili antiparalelan njegovom smeru kretanja. Otuda sledi da pored ukupne promene ugaonog momenta, $\Delta l = \pm 1$, pri emisiji cirkularno polarizovanog fotona mora da se promeni i projekcija ugaonog momenta atoma, za iznos $\pm\hbar$, i to ona projekcija koja je paralelna pravcu kretanja fotona. Pošto projekciju ugaonog momenta na izabrani pravac izražavamo odgovarajućim (magnetnim, *m*) kvantnim brojem, zaključujemo da pri emisiji cirkularno polarizovanog fotona dolazi do promene magnetnog kvantnog broja za jedinicu, dakle, $\Delta m = \pm 1$. Sličnim dokazima nalazimo da je pri emitovanju linearno polarizovanog talasa $\Delta m = 0$. Ovo je očigledno ako posmatramo poseban slučaj kada je foton emitovan normalno na pravac *z*-ose. Projekcija ukupnog momenta koji foton sa sobom odnosi jednaka je nuli, pa je i promena *z*-projekcije ugaonog momenta jednaka nuli, dakle $\Delta m = 0$. Svi ostali slučajevi mogu da se opišu slaganjem stanja linearno i cirkularno polarizovanih fotona.

Dakle, za objašnjenje Zemanovog efekta treba da imamo u vidu sledeće činjenice:

a) Zračenje može da se emituje samo između stanja za koja se orbitni kvantni broj menja za jedinicu: $\Delta l = \pm 1$. Pri tome, magnetni kvantni broj može da se promeni za jedinicu ili da ostane neizmenjen: $\Delta m = 0, \pm 1$;

b) Pri promeni magnetnog kvantnog broja, $\Delta m = \pm 1$, emituje se cirkularno polarizovano zračenje. Ako se magnetni kvantni broj posle emisije ne menja, $\Delta m = 0$, zračenje je linearno polarizovano;

c) Zračenje proizvoljno usmerenog dipola može da se predstavi kao slaganje zračenja Hercovog dipola koji je postavljen u pravcu izabrane *z*-ose (na primer, u pravcu spoljašnjeg magnetnog polja) i dva stalna dipola koji kruže oko pravca izabrane ose u suprotnim smerovima;

d) Hercov dipol emituje samo linearno polarizovano zračenje čija je ravan polarizacije paralelna osi dipola, dakle *z*-osi ili spoljašnjem magnetnom polju;

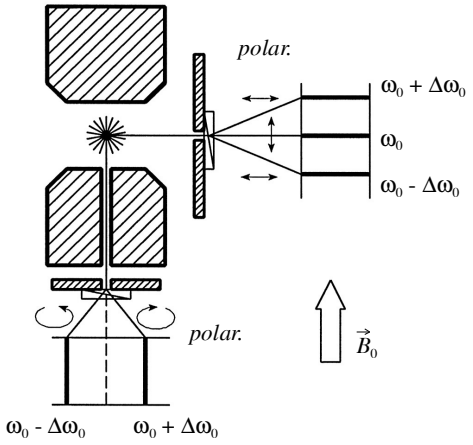
e) Hercov dipol ne može da emituje zračenja u pravcu ose dipola, dakle paralelno *z*-osi ili magnetnom polju koje je paralelno sa ovom osom;

f) Rotirajući dipol emituje cirkularno polarizovano zračenje u pravcu ose rotacije, dakle u pravcu z-ose ili u pravcu spoljašnjeg polja i linearno polarizovano zračenje normalno na taj pravac. Ravan polarizacije tog zračenja normalna je na pravac polja.

6.3.1 Normalni Zemanov efekt

Na Slici 6.3.1 prikazana je šema uređaja koji je koristio Zeman da bi posmatrao cepanje spektralnih linija u magnetnom polju. Zeman je opazio da se spektralne linije cepaju na dve ili više komponenti kada se izvor zračenja postavi u magnetno polje. U najjednostavnijem slučaju, cepanjem jedne linije nastaje triplet. Pri tome, središnja komponenta tripleta ima istu frekvenciju kao i originalna linija u odsustvu polja, dok se dve bočne linije za jednake iznose udaljavaju od prvobitne frekvencije. Veličina cepanja proporcionalna je primenjenom magnetnom polju. Zeman je, takođe, opazio to da su spektralne linije polarizovane. Posmatrane u pravcu normalnom na pravac polja spektralne linije su linearno polarizovane i to središnja paralelno polju, a spoljašnje linije normalno na pravac polja. U pravcu paralelnom primenjenom spoljašnjem polju izvor emituje samo dve spoljašnje komponente koje su cirkularno polarizovane u suprotnim smerovima.

Zato što se sve spektralne linije cepaju u magnetnom polju na dve ili više komponenata, očigledno je da je Zemanov efekt opšta pojava i kao takva posledica je osnovnih načela izgradnje atoma. To znači da eksperimentalno opažanje efekta i njegovo objašnjenje omogućavaju da se pronikne u najdublju suštinu građe materije. O značaju efekta najbolje govori činjenica da su godine 1902. Nobelove nagrade za fiziku dodeljene Zemanu za otkriće efekta i Lorencu za njegovo teorijsko objašnjenje.



Slika 6.3.1 Normalni Zemanov efekt sa spektralnim pomacima i polarizacijom spektralnih linija kada se posmatraju u pravcu polja i u pravcu normalnom na polje.

6.3.2 Klasična (Lorencova) teorija normalnog Zemanovog efekta

Lorencova teorija normalnog Zemanovog efekta oslanja se na klasičnu teoriju zračenja. Mi ćemo se služiti samo kvalitativnim dokazima da bismo pokazali vezu između pomaka frekvencije emitovanog zračenja, ugaone zavisnosti intenziteta zračenja i polarizacije zračenja.

Prema Lorencu, atom u magnetnom polju može da se predstavi Hercovim dipolom čije je usmerenje proizvoljno u odnosu na pravac polja, Slika 6.3.2. Zračenje ovog dipola može da se razloži na ono koje emituje uzdužna (longitudinalna) komponenta originalnog dipola $\vec{\mu}_{D,z}$ i poprečna (transverzalna) komponenta $\vec{\mu}_{D,T}$. Dalje, poprečnu komponentu možemo da predstavimo kao slaganje dva stalna dipola koji rotiraju istom frekvencijom u suprotnim smerovima.

U odsustvu polja originalni dipol osciluje frekvencijom ω_0 i emituje zračenje (spektralnu liniju) iste frekvencije ω_0. Promene do kojih dolazi u emisiji dipola kada se ovaj unese u stalno magnetno polje najlakše se objašnjavaju ako se nezavisno posmatraju njegove tri komponente I, II i III, Slika 6.3.2:

(I) Ova komponenta predstavlja projekciju originalnog dipola na *z*-osu duž koje deluje magnetno polje indukcije $\vec{B}_0$. Pošto naelektrisanje u dipolu osciluje duž pravca spoljašnjeg polja, dakle $\upsilon \parallel \vec{B}_0$ ($\vec{\upsilon}$ je brzina kretanja naelektrisanja u dipolu), Lorencova sila koja deluje na naelektrisanje u pokretu jednaka je nuli i dipol emituje zračenje kao i kada nema polja. Zbog toga što je u pitanju Hercov dipol, zračenje je linearno polarizovano duž pravca delovanja polja. Isto tako, intenzitet zračenja u pravcu delovanja polja jednak je nuli. Prema tome, ova komponenta originalnog oscilujućeg dipola daje središnju liniju u normalnom Zemanovom efektu, koja ne menja frekvenciju i koja je linearno polarizovana paralelno polju. Posmatrano duž pravca delovanja polja ova komponenta se ne vidi;

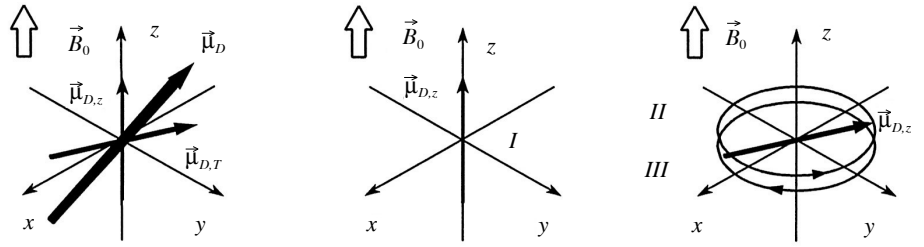
(II) Ova komponenta predstavlja stalni dipol koji rotira u pozitivnom smeru oko *z*-ose. Pošto je celokupna masa dipola skoncentrisana u pozitivnom naelektrisanju (atomskom jezgru), negativno naelektrisanje *-e* vrši pozitivnu rotaciju oko *z*-ose. Dinamičku stabilnost ovom sistemu daje ravnoteža između centripetalne sile $\vec{F}_0$, kojom pozitivno naelektrisanje privlači negativno, i centrifugalne sile $\vec{F}_c$, koja se javlja kao posledica kretanja mase *m* po krugu poluprečnika *r* perifernom brzinom υ_o:

$$\vec{F}_o + \vec{F}_c = 0 \tag{6.3.1}$$

$$\vec{F}_c = \frac{m\upsilon_0^2}{r}\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} \tag{6.3.2}$$

$$\vec{F}_o = -\frac{m\upsilon_0^2}{r}\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} \tag{6.3.3a}$$

ili s obzirom na vezu između periferne i ugaone brzine, $\upsilon = \omega r$:



Slika 6.3.2 Lorencov model atoma u magnetnom polju: a) atom koji zrači predstavlja se proizvoljno usmerenim Hercovim dipolom. Zračenje tog dipola, dobija se kao vektorski zbir zračenja njegove uzdužne (u pravcu polja) i poprečne (normalno na pravac polja) komponente; b) uzdužna komponenta *I* dobija se projektovanjem dipola na *z*-osu koja je paralelna spoljašnjem polju $\vec{B}_0$; c) poprečna komponenta dobija se projektovanjem Hercovog dipola na *xy*-ravan. Zračenje ove komponente može da se smatra slaganjem zračenja koje emituju dva stalna dipola, II i III, koji rotiraju u suprotnim smerovima.

$$\vec{F}_0 = -m\omega_0^2 r\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}. \tag{6.3.3b}$$

Ako na ovaj sistem deluje spoljašnje magnetno polje indukcije $\vec{B}_o$, koje je normalno na ravan rotacije dipola, na naelektrisanje (elektron) će delovati dopunska elektromagnetna (Lorencova) sila:

$$\vec{F}_L = -e\vec{\upsilon}_0 \times \vec{B}_0. \tag{6.3.4a}$$

ili s obzirom na to da je $\vec{\upsilon}_0 \perp \vec{B}_0$.

$$\vec{F}_L = -e\upsilon_0 B_0\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}. \tag{6.3.4b}$$

U magnetnom polju dodatna sila $\vec{F}_L$ narušava prvobitnu dinamičku ravnotežu centrifugalne i centripetalne sile. Novi uslov za ravnotežu sila, kada deluje i dodatna sila:

$$\vec{F}_o + \vec{F}_L + \vec{F}_c = 0 \tag{6.3.5a}$$

iziskuje promenu bilo centrifugalne, bilo centripetalne sile. Pošto je dipol krut, rastojanje između naelektrisanja se ne menja, pa ni (elektrostatička) centripetalna sila. Znači, menja se samo centrifugalna sila. Zbog stalnosti mase naelektrisanja i rastojanja (m = const., r = const., e = const.) jedina veličina koja može da se promeni jeste ugaona brzina elektrona (i njoj pridružena periferna brzina). Umesto prvobitne, ω_0, sada elektron kruži novom ugaonom brzinom, ω (i novom perifernom brzinom υ).

Zamenom izraza za centripetalnu silu (6.3.3a), Lorencovu silu (6.3.4b) i centrifugalnu silu (6.3.2) u uslovu za ravnotežu sila (6.3.5a) nalazimo da je:

$$-m\omega_0^2 r\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} - e\omega r B_0\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} + m\omega^2 r\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} = 0 \qquad (6.3.5b)$$

i posle sređivanja:

$$\omega^2 - \omega_0^2 = \frac{e\omega B}{m}. \qquad (6.3.6)$$

I pri najjačim poljima koja mogu da se ostvare u laboratoriji promena ugaone brzine je relativno mala, $\omega \approx \omega_0$, pa uz smenu $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ nalazimo približan izraz:

$$\omega^2 - \omega_0^2 = (\omega - \omega_0)(\omega + \omega_0) \approx 2\omega\Delta\omega.$$

Njegovom zamenom u (6.3.6) nalazimo izraz za promenu kružne frekvencije rotirajućeg dipola, $\Delta\omega$, u magnetnom polju indukcije $\vec{B}_0$:

$$\Delta\omega = \frac{eB_0}{2m}. \qquad (6.3.7)$$

Zbog promene rotacione frekvencije dipola, za isti iznos menja se i frekvencija zračenja koje ovaj dipol emituje tako da je frekvencija zračenja kada je izvor u magnetnom polju:

$$\omega = \omega_0 + \frac{eB_0}{2m}. \qquad (6.3.8a)$$

Uz porast frekvencije emitovanog zračenja, u magnetnom polju dolazi i do njegove polarizacije. Zračenje emitovano u pravcu polja je cirkularno polarizovano kako je opisano za slučaj rotirajućeg dipola u odeljku D-6.3.1. Zračenje emitovano u pravcu normalnom na polje, linearno je polarizovano, pri čemu je ravan polarizacije normalna na pravac delovanja polja. Ovim je u potpunosti objašnjeno ponašanje druge komponente Zemanovog tripleta;

(III) Ovaj rotirajući dipol ima iste osobine kao i dipol II, s jedinom razlikom da su znak efekta i smer cirkularne polarizacije suprotni. Dakle, dipol koji rotira u **negativnom** smeru u odnosu na vektor spoljašnjeg magnetnog polja, u magnetnom polju emituje spektralnu liniju na frekvenciji:

$$\omega = \omega_0 - \frac{eB_0}{2m} \qquad (6.3.8b)$$

koja je cirkularno polarizovana u suprotnom smeru od polarizacije komponente II.

Kao što vidimo, Lorenc je klasičnim razmatranjem uspeo da objasni kvantitativno sve eksperimentalne pojave normalnog Zemanovog efekta, počevši od frekvencije spektralnih linija pa do njihove polarizacije i intenziteta. Ovaj uspeh pred-

stavljao je sjajnu potvrdu Lorencove klasične elektronske teorije. Međutim, nemogućnost da objasni anomalni Zemanov efekt ukazivala je na njena ozbiljna ograničenja, što je postalo očigledno tek uobličavanjem kvantne teorije atoma. Kvantna teorija mogla je da objasni ne samo normalni i anomalni Zemanov efekt, već i niz drugih eksperimenata koji su protivrečili klasičnim predstavama.

Jasno, kvantno-mehaničko objašnjenje Zemanovog efekta prevazilazi okvire ovoga kursa. U sledećem odeljku, međutim, potpuno ćemo opisati Zemanov efekt preko vektorskog modela u koji je ugrađen dobar deo postulata i principa kvantne teorije.

6.3.3 Opis Zemanovog efekta preko vektorskog modela atoma

Normalni Zemanov efekt opaža se kod prelaza između singuletnih stanja, dakle, između onih stanja za koja je $\Sigma\, s_i = 0$ (neutralni atomi He, Zn, Cd, Hg,...). Pošto se spinski momenti sparivanjem uzajamno poništavaju, ukupni moment atoma kao celine potiče samo od orbitnog kretanja elektrona. Zato se ponašanje ovakvih atoma u magnetnom polju opisuje preko osobina orbitnog ugaonog momenta koje su izložene u odeljku 6.1. Saglasno pravilima izbora, $\Delta l = \pm 1$, normalni Zemanov efekt može da se opazi pri elektronskim prelazima $^1S_0$ - $^1P_1$, $^1P_1$ - $^1D_2$, $^1D_2$ - $^1F_3$, itd. Na Slici 6.3.3 prkazan je dijagram energijskih stanja prelaza $^1D_2$ - $^1P_1$ neutralnog atoma kadmijuma. Bez spoljašnjeg polja opaža se samo jedna spektralna linija (na karakterističnoj frekvenciji ω_0) jer su nivoi degenerisani. Magnetno polje uklanja degeneraciju i cepa prvobitne nivoe na $(2J+1)$ stanja (J je unutrašnji kvantni broj – veliko slovo označava višeelektronski sistem). Pošto je kod singuletnih stanja S=0, to je i J=L, pa je šema cepanja energijskih nivoa ista kao ona kod orbitnog ugaonog momenta, kao što prikazuje Slika 6.1.2. Za stanje $^1D_2$ je $L = 2$, pa se originalni nivo cepa na pet novih nivoa ($2L + 1 = 5$), a za $^1P_2$ je $L = 1$ i nivo se cepa na tri nova. Saglasno izrazu:

(6.1.2c) $$U_m = m_l \mu_B B_0$$

magnetna energija određenog stanja proporcionalna je njegovom magnetnom kvantnom broju m_l (za višeelektronski sistem m_L) i magnetnoj indukciji primenjenog polja, B_0, i **ne zavisi** od vrednosti ukupnog ugaonog momenta odnosno od orbitnog kvantnog broja L. To znači da je energijska razlika između nivoa $^1D_2$ ista kao i energijska razlika između $^1P_2$ nivoa:

$$\Delta U_m = \Delta m_L \mu_B B_0 \,. \tag{6.3.9}$$

Prvobitna energijska razlika, ΔU_0, između degenerisanih D i P nivoa menja se u magnetnom polju za iznos, ΔU_m, izražen jednačinom (6.3.9). Tada je nova energijska razlika u magnetnom polju, ΔU, jednaka zbiru:

$$\Delta U = \Delta U_0 + \Delta U_m \tag{6.3.10a}$$

odnosno s obzirom na (6.3.9):

$$\Delta U = \Delta U_0 + \Delta m_L \mu_B B_0 \,. \tag{6.3.10b}$$

Dakle, u magnetnom polju energijska razlika između P i D stanja među kojima dolazi do prelaza (s obzirom na to da je $\Delta L = \pm 1$) postaje zavisna i od promene magnetnog kvantnog broja Δm_L. Saglasno pravilima izbora, do energijskog prelaza (emisije ili apsorpcije zračenja) može da dođe samo između onih nivoa za koje je, pored $\Delta L = \pm 1$ i $\Delta m_L = 0, \pm 1$, Slika 6.3.3. Tako će od mnoštva energijskih razlika određenih izrazom (6.3.10b), spektroskopski biti aktivne samo tri:

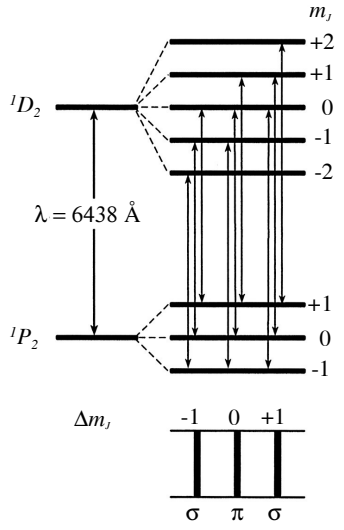
$$\begin{aligned} \Delta m_L &= +1: \quad \Delta U_{\sigma^+} = \Delta U_0 + \mu_B B_0 \\ \Delta m_L &= 0: \quad \Delta U_{\pi} = \Delta U_0 \\ \Delta m_L &= -1: \quad \Delta U_{\sigma^-} = \Delta U_0 - \mu_B B_0 . \end{aligned} \tag{6.3.10c}$$

Odgovarajuće frekvencije prelaza nalazimo (s obzirom na odnos $\Delta U = \hbar\omega$) deˇenjem dobijenih izraza Plankovom konstantom $\hbar$. Imajući u vidu i odnos:

(5.1.9a,b)
$$\frac{\mu_B}{\hbar} = \frac{e}{2m}$$

za frekvencije prelaza nalazimo:

$$\begin{aligned} \omega_{\sigma^+} &= \omega_0 + \frac{e}{2m} B_0 \\ \omega_{\pi} &= \omega_0 \\ \omega_{\sigma^-} &= \omega_0 - \frac{e}{2m} B_0 . \end{aligned} \tag{6.4.11}$$



Slika 6.3.3 Normalni Zemanov efekt kod $^1P_1$ - $^1D_2$ prelaza neutralnog atoma kadmijuma, λ = 6438 Å. U magnetnom poˇu originalna linija cepa se na tri komponente. Prelazi pri $\Delta m = 0$ daju središnju linearno polarizovanu π liniju čiji položaj ne zavisi od magnetnog polja. Cirkularno polarizovane σ linije koje se pomeraju proporcionalno indukciji magnetnog polja potiču od prelaza pri $\Delta m = \pm 1$.

Treba uočiti to da je frekventni pomak cirkularno polarizovanih σ linija jednak Larmorovoj frekvenciji kojom magnetni moment atoma precesuje u magnetnom polju, jednačina (6.1.1c), što nije iznenađujuće s obzirom na njihovo istovetno poreklo. Naime, i Zemanov efekt i Larmorova precesija potiču od dejstva spoljašnjeg magnetnog polja na magnetni moment atoma. Ovde dobijene frekvencije prelaza iste su kao i one u prethodnom odeljku koje smo našli koristeći klasičnu sliku (6.3.8a,b). Tajna uspeha klasične teorije da valjano opiše u suštini kvantni efekt krije se u tome što Larmorova frekvencija ne zavisi od Plankove konstante h. Saglasno principu korespondencije, svaka veličina ili međudejstvo u kojima se ne pojavljuje Plankova konstanta može da se na odgovarajući način opiše i klasičnom i kvantnom teorijom.

6.3.4 Anomalni Zemanov efekt

Anomalni Zemanov efekt javlja se u sistemima kod kojih ugaoni (i magnetni) moment stanja između kojih se dešava optički prelaz ne mogu da se opišu samo jednim od kvantnih brojeva L ili S nego zavise od oba ova broja. Ovo je, u stvari, opšti slučaj stanja atoma gde atomski magnetizam nastaje slaganjem orbitnog i spinskog doprinosa. Kako smo već pokazali u odeljku 5.4.4 relativni doprinos spinskog i orbitnog magnetnog momenta ukupnom magnetizmu atoma izražava se atomskim g_j-faktorom. Pošto se spektralni termovi $^{2S+1}L_j$ međusobno razlikuju po relativnom doprinosu spinskog i orbitnog ugaonog momenta ukupnom momentu, to svaki term ima karakterističnu vrednost g_j-faktora. Ovo je posledica razlike u veličini orbitnog i spinskog žiromagnetnog odnosa elektrona. Svakoj kombinaciji spinskog, orbitnog i ukupnog ugaonog momenta, tj. svakom termu $^{2S+1}L_j$, odgovara jedinstvena kombinacija magnetnih momenata, dakle, jedinstveni g_j faktor. Saglasno izrazu (6.1.7) kojim se izražava zavisnost magnetne energije ukupnog ugaonog momenta u magnetnom polju, energija svakog stanja, osim magnetnog kvantnog broja m_j i magnetne indukcije B_0, zavisi i od Landeovog g_j-faktora:

$$U_{m,j} = g_j m_j \mu_B B_0 \,. \tag{6.3.12}$$

Zbog različitih g_j faktora cepanje energijskih nivoa osnovnog i pobuđenog stanja je različito, što dovodi do pojave većeg broja linija u magnetnom polju nego kod normalnog Zemanovog efekta. U polju indukcije B_0 ukupna energija osnovnog stanja atoma jednaka je zbiru energije van polja, U_0, i magnetne energije, $U_{m,j}$:

$$U = U_0 + U_{m,j}$$

$$U = U_0 + g_j m_j \mu_B B_0 \,. \tag{6.3.13a}$$

Na isti način i energija pobuđenog stanja, U^*, zavisi od zbira energije van polja, U^*_0, i energije međudelovanja atomskog magnetnog momenta i spoljašnjeg polja, $U^*_{m,j}$:

$$U^* = U_0^* + U_{m,j}^*$$

$$U^* = U_0^* + g_j^* m_j^* \mu_B B_0 . \tag{6.3.13b}$$

Energija prelaza ΔU_0 jednaka je razlici energija pobuđenog i osnovnog stanja. Bez polja:

$$\Delta U_0 = U_0^* - U_0 \tag{6.3.14}$$

a u polju:

$$\Delta U_{m,j} = \Delta U_0 + (g_j^* m_j^* - g_j m_j)\mu_B B_0 . \tag{6.3.15}$$

Osnovno stanje se cepa na $(2j+1)$ nivoa, a pobuđeno na $(2j^*+1)$, te ukupno imamo $(2j+1)(2j^*+1)$ mogućih prelaza između osnovnog i pobuđenog stanja. Prema pravilima izbora, međutim, spektralni prelazi se opažaju samo između stanja za koja je $\Delta m_j = 0, \pm 1$, odnosno kada je $m_j^* = m_j$, $m_j^* = m_j - 1$ i $m_j^* = m_j + 1$. Zamenom ovih uslova u izraz (6.3.15), nalazimo energije zračenja emitovanog iz atoma koji se nalazi u magnetnom polju:

$$\pi: \ \Delta m = 0, \qquad \Delta U_{m,j} = \Delta U_0 + (g_j^* - g_j) m_j \mu_B B_0 \tag{6.3.16a}$$

$$\sigma^+: \ \Delta m = +1, \qquad \Delta U_{m,j} = \Delta U_0 + (g_j^* - g_j) m_j \mu_B B_0 + g_j^* \mu_B B_0 \tag{6.3.16b}$$

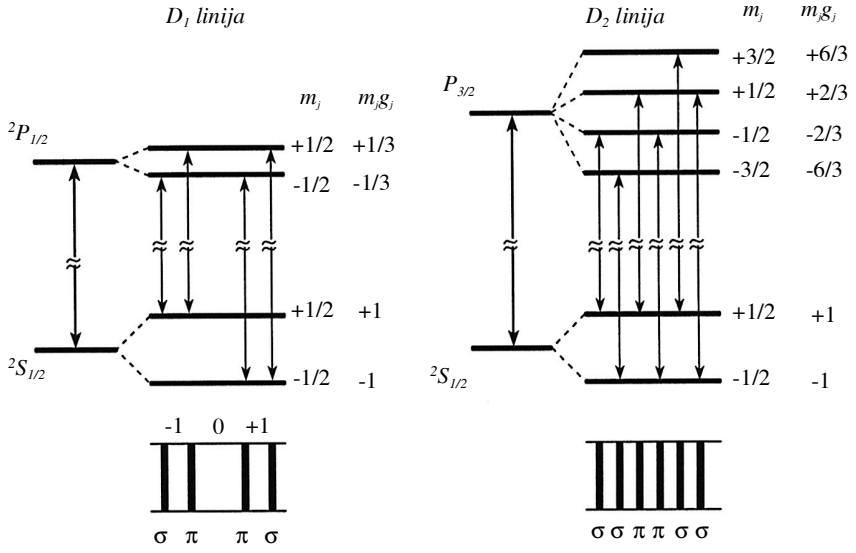
$$\sigma^-: \ \Delta m = -1, \qquad \Delta U_{m,j} = \Delta U_0 + (g_j^* - g_j) m_j \mu_B B_0 - g_j^* \mu_B B_0 . \tag{6.3.16c}$$

Zbog složene zavisnosti Landeovih g-faktora od kvantnih brojeva j, l i s (J, L i S u višelektronskim atomima) jednačine u prikazanom obliku nisu naročito pogodne za opštu analizu Zemanovog efekta. Međutim, zamenom vrednosti za odgovarajuće g-faktore, svaki poseban slučaj spektralnog prelaza može da se njima uspešno analizira, kao što će dalje biti pokazano. Važno je uočiti to da se pri $g_j^* = g_j$ jednačine (6.3.16) svode na izraze (6.3.10c), kojima se opisuje cepanje linija kod normalnog Zemanovog efekta. Ovaj uslov, $g_j^* = g_j$, ispunjen je kada je $S = 0$ [$g = 1$, jednačina (5.4.29d)]. Dakle, normalni Zemanov efekt predstavlja samo poseban slučaj anomalnog Zemanovog efekta. (Imajući ovo u vidu bilo bi logičnije da se nazivi dva efekta međusobno zamene. Međutim, stari nazivi sačuvani su iz istorijskih razloga.)

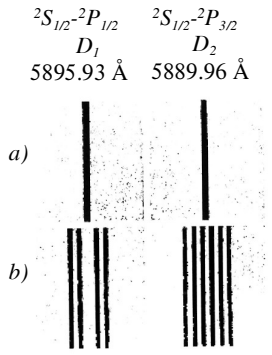
Iz jednačina (6.3.16) lako se dobija broj komponenata na koje se cepa originalna spektralna linija. Ako je $j^* > j$, na primer, kod prelaza ${}^2P_{3/2}$-${}^2S_{1/2}$, tada se pri svakoj vrednosti magnetnog kvantnog m_j javljaju tri prelaza: σ^+, π i σ^-. Pošto je broj različitih m_j stanja $(2j + 1)$, ukupan broj prelaza iznosi $3(2j + 1)$. Kada je $j^* = j$, na primer, kod prelaza ${}^2P_{1/2}$ - ${}^2S_{1/2}$, pošto $(m_j)_{\max} = (m_j^*)_{\max}$ pri najvećoj vrednosti magnetnog kvantnog broja ne postoji prelaz σ^+ za koji je $\Delta m = +1$. Isto tako, pri najmanjoj vrednosti magnetnog kvantnog broja ne postoji prelaz σ^- jer je $(m_j)_{\min} = (m_j^*)_{\min}$ ($\Delta m = 0, +1$). Tada je ukupan broj komponenata na koje se cepa linija $3(2j + 1) - 2$. Istim dokazima (prebrojavanjem prelaza sa $\Delta m = 0$ i prelaza sa $\Delta m = \pm 1$) možemo lako da nađemo da se pri $j^* > j$, linija cepa na $(2j + 1)$ π-komponenata i $2(2j + 1)$ σ-komponenata. Kada je $j^* = j$, javlja se isti broj π-komponenata kao u prethodnom slučaju, $2j + 1$, a broj σ linija je $2(2j + 1) - 2$. Dakle, prebrojavanjem različito polarizovanih linija može da se dobije kvalitativna predstava o vrsti spektralnog prelaza $j^* = j$ ili $j^* \neq j$. Celokupna slika dobija se kvantitativnom analizom nastalog multipleta. Na primer, energijsku razliku između najbližih σ^+ σ^- linija nalazimo iz razlike izraza (6.3.16a) i (6.3.16b):

$$(U_{\sigma+} - U_{\sigma-})m_{j=const.} = 2g^*_j \mu_B B_0. \qquad (6.3.17)$$

Ako je indukcija poznata, tada iz poslednjeg izraza može da se dobije vrednost g^*_j. Sličnim kombinacijama dobija se i Landeov g-faktor osnovnog stanja g_j. Iz tako prikupljenih podataka mogu da se potpuno opišu spektralni termovi osnovnog i pobuđenog stanja, dakle, posmatrani prelaz može u potpunosti da se opiše.



Slika 6.3.4 Anomalni Zemanov efekt: cepanje linija natrijumovog dubleta, D_1 i D_2 u magnetnom polju. Komponenta D_1 cepa se na četiri, a D_2 na šest novih linija.



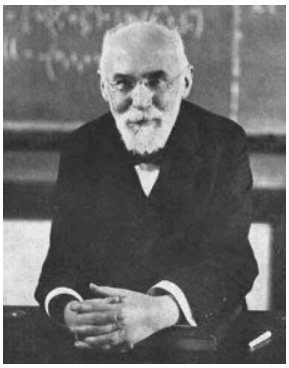
Slika 6.3.5 Spektralne linije natrijumovog dubleta: a) bez polja; b) u magnetnom polju.

Kao primer anomalnog Zemanovog efekta razmatraćemo cepanje D dubleta natrijuma u magnetnom polju, Slika 6.3.4: D_1 linija cepa se na četiri, a D_2 linija na šest novih linija. Odatle nalazimo da je za D_1 liniju $j^* = j = 1/2$ [$3(2j+1) - 2 = 4$], a za D_2 liniju $j = 1/2$ i $j^* > j$ [$3\cdot(2j + 1) = 6$]. Vrednost $j = 1/2$ imamo samo ako je $l = 0$, jednačina (5.4.20c), odakle nalazimo da je $s = 1/2$. Prema tome, spektralni term osnovnog stanja je $^2S_{½}$. Prema pravilima izbora $\Delta l = \pm 1$. Iz stanja $l = 0$ jedino je moguć prelaz u stanje $l = 1$. Otuda je za D_1 liniju spektralni term pobuđenog stanja $^2P_{½}$: P jer je $l = 1$, $P_{½}$ jer je $j^* = j = 1/2$ i ^2P jer je $s = |j - l| = 1/2$, $2s + 1 = 2$. Na sličan način za D_2 liniju nalazimo da je term osnovnog stanja $^2S_{½}$, a pobuđenog $^2P_{3/2}$: P jer je $l^* = 1$, $P_{3/2}$ jer je $j^* > j$ i $^2P_{3/2}$ jer je $s = 1/2$.

Dakle, cepanje termova na jedinstven način zavisi od kvantnih brojeva l, s i j (kod višeelektronskih atoma L, S i J). Iz Zemanovog efekta eksperimentalno mogu da se odrede kvantni brojevi stanja između kojih dolazi do prelaza.

Oto Štern (Otto Stern, 1888–1969), rođen je u Zorau (Nemačka); diplomirao je na Breslauskom univerzitetu. Predavao je na univerzitetima u Pragu i Cirihu (istovremeno kada i Ajnštajn) i, kasnije, u Rostoku (1921) i Hamburgu (1923). U Hamburgu je u isto vreme bio i direktor Fizičkohemijskog instituta. Godine 1915. počeo je da radi na razvoju metode molekulskih snopova za određivanje atomskih i nuklearnih osobina. Posebno su bili uspešni njegovi eksperimenti kojima je utvrdio kvantnu prirodu magnetnog momenta atoma (Štern-Gerlahov eksperiment), talasnu prirodu materije (difrakcija molekulskih snopova vodonika i helijuma na kristalima, 1929) i magnetni moment protona. Godine 1933. emigrirao je u SAD gde je nastavio sa radom u Karnegijevom tehnološkom institutu u Pitsburgu. Nobelovu nagradu za fiziku dobio je 1943. godine, za doprinos razvoju metode molekulskih snopova i otkriće magnetnog momenta protona.

Valter Gerlah (Walther Gerlach, 1889–1979), rođen je u Biebrihu (Nemačka). Bio je profesor u Frankfurtu, Tibingenu i od 1929. u Minhenu. Tačno je odredio vrednost Štefan-Bolcmanove konstante 1916. godine. Zajedno sa Šternom 1929. godine pokazao je da su magnetni momenti atoma kvantirani.



Hendrik Anton Lorenc (Hendrik Antoon Lorentz, 1853–1928), rođen je u Arnhemu (Holandija), a doktorirao je na Lajdenskom univerzitetu 1875. godine. Bio je direktor Tejlorove laboratorije u Harlemu i docent u Lajdenu. Godine 1903. izveo je jednačine (čuvene Lorencove transformacije) na osnovu kojih je Ajnštajn formulisao specijalnu teoriju relativnosti. Lorenc se bavio istraživanjima u mnogim oblastima teorijske fizike: elektrodinamikom, teorijom gravitacije, termodinamikom, teorijom zračenja i kinetičkom teorijom gasova. Za objašnjenje Zemanovog efekta godine 1902. podelio je Nobelovu nagradu sa Zemanom.

Piter Zeman (Pieter Zeeman, 1865–1943), rođen je u Zonemairu (Holandija), a završio je Lajdenski univerzitet gde je neko vreme bio i profesor. Godine 1900. postaje profesor Amsterdamskog univerziteta, a 1908. i direktor Fizičkog instituta u Amsterdamu. Pojavu cepanja spektralnih linija u magnetnom polju otkrio je godine 1896. Ta pojava je po njemu i dobila ime – *Zemanov efekt*. Nobelovu nagradu za fiziku podelio je 1902. godine sa Lorencom za istraživanje uticaja magnetizma na radijacione pojave.

7. FOTON – ELEKTROMAGNETNI KVANT

7.1 FOTOELEKTRIČNI EFEKT

DODATAK 7.1

D-7.1 Klasična i kvantne statistike

Klasični zakon raspodele čestica po energijama postavili su J. Maksvel i L. Bolcman polazeći od sledećih pretpostavki:

a) Verovatnoća da određeni molekul A ima energiju ε, nezavisna je od toga da li drugi molekuli B, C, D, ... imaju istu ili neku drugu vrednost energije – kao što je kod bacanja kocke verovatnoća svakog pojedinačnog rezultata pri bacanju nezavisna od prethodnog bacanja;

b) Prema klasičnoj statistici, verovatnoća da u jednom sistemu N čestica ima energiju između ε i $\varepsilon + d\varepsilon$ određena je brojem načina ostvarivanja ovog stanja;

c) Pretpostavlja se da čestice mogu da se razlikuju, a raspodela se određuje prema kriterijumu maksimalne verovatnoće.

Primeri

Primer D–7.1.1 Na koliko načina pet čestica može da se raspodeli tako da dve imaju energiju ε_1, a tri energiju ε_2.

Čestice ćemo označiti brojevima: 1, 2, 3, 4, i 5. Tražena raspodela može da se ostvari na sledeće načine:

ε_1	ε_2
1 2	3 4 5
1 3	2 4 5
1 4	2 3 5
1 5	2 3 4
2 3	1 4 5
2 4	1 3 5
2 5	1 3 4
3 4	1 2 5
3 5	1 2 4
4 5	1 2 3 .

Ovih 10 načina može da se izračuna pomoću izraza: $5!/ (2!\, 3!)=(5\cdot4\cdot3\cdot2\cdot1)/(2\cdot1\cdot3\cdot2\cdot1)=10$.

Primer D–7.1.2 Sistem se sastoji od tri čestice, a energija sistema je $3u$. Ako svaka čestica može da ima energiju 0, u, $2u$, odrediti najverovatniju raspodelu.
Prva mogućnost jeste da sve tri čestice imaju energiju u: $w = 3!/3! = 1$.
Druga mogućnost jeste da dve čestice imaju energiju 0, a treća energiju $3u$. Kako čestice mogu da se razlikuju označavamo ih sa 1, 2, 3, pa ovakva mogućnost može da se ostvari na tri načina: 1. način: 1 (0) 2 (0) 3($3u$); 2. način: 1 (0) 2 ($3u$) 3 (0); 3. način: 1 ($3u$) 2 (0) 3 (0). Ova tri načina dobijamo pomoću jednačine $w = (3!)/(1!\ 2!) = 3$.
Treća mogućnost jeste da jedna čestica ima energiju 0, druga u, a treća $2u$. Ovo može da se ostvari na šest načina pošto čestice mogu da se razlikuju: 1. način: 1 (0) 2 (u) 3 ($2u$); 2. način: 1 (0) 2 ($2u$) 3 (u); 3. način: 1 (u) 2 ($2u$) 3(0); 4. način: 1 (u) 2 (0) 3($2u$); 5. način: 1 ($2u$) 2 (0) 3 (u); 6. način: 1 ($2u$) 2 (u) 3 (0). Broj načina ostvarivanja ovakve raspodele w izračunava se po jednačini: $w = 3!/(1!\ 1!\ 1!) = 6$. Najverovatnija je treća raspodela jer može da se ostvari na više načina.

D-7.1.1 Bolcmanova raspodela

Podelimo celokupni prostor na male oblasti i označimo ih indeksima $i = 1,2,3..i$. U i-toj oblasti nalazi se N_i čestica sa energijom ε_i. Svaka oblast sadrži g_i ćelija, što znači da svaku česticu možemo da raspodelimo na g_i načina. G_i je statistička težina stanja ε_i i predstavlja broj stanja iste energije. Izračunavamo sada verovatnoću w da:

N_1 čestica bude u oblasti 1, sa energijom ε_1,
N_2 čestica bude u oblasti 2, sa energijom ε_2,
N_i čestica bude u oblasti i, sa energijom ε_i.

Ova verovatnoća jednaka je:

$$w = \frac{N!}{N_1!N_2!N_3!\ldots N_i!} g_1^{N_1} g_2^{N_2} g_3^{N_3} \ldots g_i^{N_i}. \qquad \text{(D-7.1.1)}$$

Izraz (D-7.1.1) podrazumeva da čestice mogu da se razlikuju. Potražimo sada prirodni logaritam izraza (D-7.1.1):

$$\ln w = \ln N! - \sum_i \ln N_i! + N_1 \ln g_1 + N_2 \ln g_2 + \ldots + N_i \ln g_i \qquad \text{(D-7.1.2)}$$

i na njega primenimo Stirlingovu formulu koja važi kada je broj N veoma veliki:

$$\ln N! = N \ln N - N.$$

Tada se dobija:

$$\ln w = N \ln N - \sum_i N_i \ln N_i + \sum_i N_i \ln g_i. \qquad \text{(D-7.1.3)}$$

Potražimo maksimum raspodele, što znači $d\ lnw$, uz uslov da su energija i ukupni broj čestica stalni:

$$\sum N_i = N \qquad \text{(D-7.1.4)} \qquad \sum_i N_i \varepsilon_i = E. \qquad \text{(D-7.1.5)}$$

Takođe, važi:

$$\sum_i dN_1 = 0 \qquad \text{(D-7.1.4a)} \qquad \sum_i \varepsilon_i dN = 0. \qquad \text{(D-7.1.5a)}$$

Zbog uslova (D-7.1.4) i (D-7.1.5) kao i (D-7.1.4a) i (D-7.1.5a), sve varijacije (diferencijali) nisu nezavisne, što se uzima u obzir pomoću metode Lagranževih multiplikatora. Jednačina (D-7.1.4a) pomnoži se sa -α, a jednačina (D-7.1.4b) sa -β, pa se dobija:

$$-\alpha\sum_i N_i - \beta\sum_i \varepsilon_i dN_i = 0.$$

Prethodni izraz dodaje se na *d lnw* i izjednačava s nulom:

$$d\ln w - \alpha\sum_i dN_i - \beta\sum_i \varepsilon_i dN_i = 0. \qquad \text{(D-7.1.6)}$$

Izračunaćemo sada izraz (D-7.1.6), uzimajući u obzir (D-7.1.3):

$$\sum_i [-\ln N_i dN_i - dN_i + \ln g_i dN_i - \alpha dN_i - \beta\varepsilon_i dN_i] =$$

$$\sum_i \left(\ln\frac{g_i}{N_i} - 1 - \alpha - \beta\varepsilon_i\right) dN_i = 0. \qquad \text{(D-7.1.7)}$$

Izraz (D-7.1.7) jednak je nuli kad se izraz u zagradi izjednači s nulom:

$$\ln\frac{g_i}{N_i} = \alpha + 1 + \beta\varepsilon_i \qquad \text{(D-7.1.8)}$$

pa je, konačno, broj čestica N_i sa energijom ε_i:

$$N_i = g_i e^{-1-\alpha} e^{-\beta\varepsilon_i} = g_i A e^{-\beta\varepsilon_i} (A = e^{-1-\alpha}). \qquad \text{(D-7.1.9)}$$

Konstante A i β odredićemo razmatranjem (Maksvelove) raspodele molekula jednoatomnog gasa po brzinama. Energija molekula zavisi od impulsa (brzine) ali i od položaja molekula u prostoru kad se on nalazi pod uticajem spoljašnjih sila (npr. Zemljine teže). Smatraćemo da energija, odnosno brzine mogu da se menjaju kontinualno, pa ćemo sa diskretnih veličina (energija npr.) preći na kontinualne i sume zameniti integralima. Broj molekula sa energijom u okolini ε_i koji smo prema (D-7.1.9) izrazili kao diskretnu veličinu N_i napisaćemo u diferencijalnom obliku kao *dN*. Broj molekula *dN* čiji su položaji između *r i r+dr* ili u pravouglom koordinatnom sistemu između *x+dx, y+dy* i *z+dz,* a brzine između υ i $\upsilon+d\upsilon$ ili u pravouglom sistemu između $\upsilon_x+d\upsilon_x$, $\upsilon_y+d\upsilon_y$ i $\upsilon_z+d\upsilon_z$ proporcionalan je elementu zapremine (faznog) prostora $dx\,dy\,dz\,d\upsilon_x\,d\upsilon_y\,d\upsilon_z$:

$$dN = Ae^{-\beta\varepsilon_i} dx dy dz d\upsilon_x d\upsilon_y d\upsilon_z \qquad \text{(D-7.1.10)}$$

pa broju stanja energije ε_i, g_i iz jednačine (D-7.1.9) odgovara veličina prostora brzina:

$$g_i \to d\upsilon_x d\upsilon_y d\upsilon_z \tag{D-7.1.11}$$

odnosno:

$$\Sigma g_i = \iiint d\upsilon_x d\upsilon_y d\upsilon_z . \tag{D-7.1.11a}$$

Ovakav element „zapremine" u sfernom koordinatnom sistemu ima oblik:

$$\iiint d\upsilon_x d\upsilon_y d\upsilon_z = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \upsilon^2 d\upsilon \sin\theta d\theta d\varphi . \tag{D.7.1.12}$$

Kako nas interesuje samo intenzitet brzine, integralićemo po uglovima θ i φ:

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 4\pi$$

pa se integral (D-7.1.12) svodi na:

$$4\pi \int_0^\infty \upsilon^2 d\upsilon . \tag{D-7.1.12a}$$

Ukupan broj čestica N određujemo integraljenjem izraza (D-7.1.10), uz uzimanje u obzir (D-7.1.12a), kao i da je:

$$\int dxdydz = V$$

$$N = 4A\pi V \int_0^\infty \upsilon^2 e^{\frac{-\beta m \upsilon^2}{2}} d\upsilon \tag{D-7.1.13}$$

gde smo u (D-7.1.13) koristili da je kinetička energija $\varepsilon = m\upsilon^2/2$ (m je masa molekula). Izraz za ukupnu energiju ima oblik:

$$E = \frac{4Am\pi}{2} \int_0^\infty \upsilon^4 e^{\frac{-\beta m \upsilon^2}{2}} d\upsilon . \tag{D-7.1.14}$$

Može da se pokaže da je:

$$\int_0^\infty \frac{d}{dx}(\upsilon^3 e^{\frac{-\beta m \upsilon^2}{2}}) = 3\int_0^\infty \upsilon^2 e^{\frac{-\beta m \upsilon^2}{2}} d\upsilon - \beta m \int_0^\infty \upsilon^4 e^{\frac{-\beta m \upsilon^2}{2}} d\upsilon .$$

Vrednost prvog integrala u navedenom izrazu je nula, pa sledi da je:

$$3\int_0^\infty \upsilon^2 e^{\frac{-\beta m\upsilon^2}{2}} d\upsilon = \beta m\int_0^\infty \upsilon^4 e^{\frac{-\beta m\upsilon^2}{2}} d\upsilon \Rightarrow$$

$$\frac{3}{\beta m} = \frac{\int_0^\infty \upsilon^4 e^{\frac{-\beta m\upsilon^2}{2}}}{\int_0^\infty \upsilon^2 e^{\frac{-\beta m\upsilon^2}{2}}}. \qquad \text{(D-7.1.15)}$$

Kad se ukupna energija E [izraz (D-7.1.14)] podeli ukupnim brojem čestica N [izraz (D-7.1.13)], dobija se izraz (D-7.1.15) pomnožen sa $3/mV$ ili:

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{2\beta V}. \qquad \text{(D-7.1.16)}$$

Ako se setimo da je na osnovu kinetičke teorije gasova ukupna energija $E = nkT$ ($n=N/V$), gde je n broj molekula po jedinici zapremine, k Bolcmanova konstanta, a T apsolutna temperatura, tada se iz (D-7.1.16) dobija:

$$E = \frac{3}{2}\frac{N}{V}\frac{1}{\beta} = \frac{3}{2}n\frac{1}{\beta} \Rightarrow \beta = \frac{1}{kT}. \qquad \text{(D-7.1.17)}$$

Konstantu A određujemo rešavanjem integrala (D-7.1.13). Integral se izračunava parcijalnim integraljenjem:

$$\int_0^\infty \upsilon^2 e^{\frac{-m\upsilon^2}{2kT}} d\upsilon = ut\Big|_0^\infty - \int_0^\infty t\, du; \quad \left[u = \upsilon;\ du=d\upsilon;\ \ dt = \upsilon e^{\frac{-m\upsilon^2}{2kT}} d\upsilon \Rightarrow t = \frac{-kT}{m} e^{\frac{-m\upsilon^2}{2kT}}\right]$$

(D-7.1.18)

$$= -\upsilon\frac{kT}{m}e^{\frac{-m\upsilon^2}{2kT}}\Big|_0^\infty + \frac{kT}{m}\int_0^\infty e^{\frac{-m\upsilon^2}{2kT}} d\upsilon = 0 + \frac{1}{2}\frac{kT}{m}\left(\frac{2\pi kT}{m}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Napomenimo da je integral u drugom redu jednačine (D-7.1.18) Ojlerov integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-at^2} dt = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \qquad \text{(D-7.1.19)}$$

Zamenom izračunatog integrala (D-7.1.18) kao i vrednosti β, prema (D-7.1.17) i (D-7.1.13), dobijamo A:

$$A = \frac{N}{V}\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} = n\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}}. \qquad \text{(D-7.1.20)}$$

Kad se u jednačinu (D-7.1.10) unesu vrednosti konstanti A i β dobijamo Maksvel-Bolcmanov zakon raspodele molekula (jednoatomnog gasa) po brzinama:

$$dN = Vdn = 4\pi Vn\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-m\upsilon^2}{2kT}} \upsilon^2 d\upsilon \qquad \text{(D-7.1.21)}$$

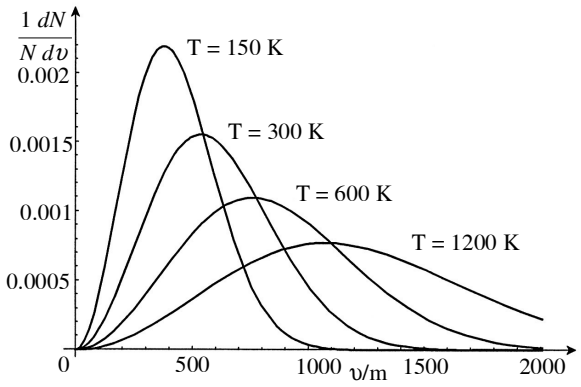
odnosno broj čestica dN (u odnosu na ukupan broj čestica N) koje imaju brzine između υ i $\upsilon + d\upsilon$. Koristeći vezu između kinetičke energije i brzine ($\varepsilon = m\upsilon^2/2$ i da je $\upsilon^2 = \sqrt{2/m^3}\sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon$) raspodelu po brzinama izražavamo kao zakon raspodele po energijama:

$$dN = 4\pi N\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{m^3}} e^{\frac{-\varepsilon}{kT}} \sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon. \qquad \text{(D-7.1.22)}$$

Maksvel-Bolcmanov zakon raspodele prikazan je na Slici D-7.1.1. Na ordinatu su nanete vrednosti, prema (D-7.1.21):

$$4\pi\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-m\upsilon^2}{2kT}} \upsilon^2 = \frac{1}{N}\frac{dN}{d\upsilon}$$

u zavisnosti od brzine υ za četiri različite temperature.



Slika D-7.1.1 Bolcmanov zakon raspodele.

D-7.1.2 Boze-Ajnštajnova statistika

Statistike Boze-Ajnštajnova i Fermi-Dirakova su kvantne statistike. One uzimaju u obzir kvantovanost energije i za razliku od Maksvel-Bolcmanove statistike polaze od pretpostavke da čestice ne mogu da se razlikuju. Boze-Ajnštajnova statistika važi za čestice s celobrojnim spinom (to su npr. fotoni, atomi s parnim brojem čestica s polubrojnim spinom,

itd.). Prema Bornovom tumačenju talasne funkcije (videti poglavlja 8.4 i 9.2), pri permutaciji dveju identičnih čestica ne dobija se novo stanje.

Primer D-7.1.3 Rapodeliti četiri čestice na tri ćelije tako da u jednoj budu tri čestice, u drugoj jedna, a u trećoj nijedna. Po Bolcmanovoj raspodeli, u ćelije a, b, c rasporedićemo čestice 1, 2, 3 i 4:

a	b	c
1 2 3	4	
1 2 4	3	
1 3 4	2	
2 3 4	1	

na četiri načina: 4!(31 1!) = 4. Postoje četiri stanja. Prema Boze-Ajnštajnovoj statistici postoji samo jedno stanje jer čestice ne mogu da se razlikuju.

Kao pri izvođenju Maksvel-Bolcmanove raspodele, celokupni prostor ćemo razdeliti na male oblasti koje obeležavamo indeksima i. U i-toj oblasti nalaziće se N_i čestica. Svaka oblast sadrži određeni broj elementarnih ćelija. U i-toj oblasti nalazi se g_i ćelija. Pitanje je na koliko različitih načina možemo da raspodelimo N_i čestica po elementarnim ćelijama i-te oblasti, pod pretpostavkom da čestice ne mogu da se razlikuju?

Primer D-7.1.4 Raspodeliti četiri čestice na tri ćelije (a, b, c):

a b c	a b c	a b c	a b c
3 1 0	1 1 2	2 2 0	4 0 0
3 0 1	1 2 1	2 0 2	0 4 0
1 0 3	2 1 1	0 2 2	0 0 4.
1 3 0			
0 3 1			
0 1 3			

Brojevi u ćeliji sada označavaju broj čestica, a ne samu česticu. Kao što vidimo, ukupni broj permutacija u našem primeru je 15, što se u opštem slučaju izražava jednačinom: $g_i\,(g_i\text{-}1 + N_i)!$ Kako čestice ne možemo da razlikujemo:

$$\frac{g_i(g_i - 1 + N_i)!}{g_i!N_i!} = \frac{(g_i + N_i - 1)!}{(g_i - 1)!N_i!}.$$

Uzmimo da se u prvoj oblasti nalazi N_1 čestica, u drugoj N_2, u trećoj N_3, ... Celokupni broj raspodela jednak je umnošku svih raspodela po pojedinim oblastima:

$$w_B = \prod_i \frac{(g_i + N_i - 1)!}{(g_i - 1)!N_i!}. \qquad \text{(D-7.1.23)}$$

Odredićemo prvo prirodni logaritam izraza (D-7.1.23):

$$\ln w_B = \sum_i \ln \frac{(g_i + N_i - 1)!}{(g_i - 1)!N_i!}.$$

i zatim zanemariti 1 i u brojiocu i imeniocu:

$$\ln w_B = \sum_i \ln \frac{(g_i + N_i)!}{g_i! N_i!} . \qquad \text{(D-7.1.24)}$$

Primenom Stirlingove formule na (D-7.1.24) dobijamo:

$$\ln w_B = \sum_i [(g_i + N_i)\ln(g_i + N_i) - g_i \ln g_i - N_i \ln N_i] . \qquad \text{(D-7.1.25)}$$

Uz uslov stalnosti broja čestica N i ukupne energije E [videti (D-7.1.4) i (D-7.1.5)] i pomoću metode Lagranževih multiplikatora (kao kod izvođenja Maksvel-Bolcmanove raspodele), najverovatniju raspodelu odredićemo iz izraza:

$$d\ln w_B - \alpha \sum_i dN_i - \beta \sum_i \varepsilon_i dN_i = 0 . \qquad \text{(D-7.1.26)}$$

Diferenciraćemo izraz (D-7.1.25) i zameniti ga u (D–7.1.26):

$$\sum_i \left[ln\ (g_i + N_i)dN_i + (g_i + N_i)\frac{1}{g_i + N_i}dN_i - InN_i dN_i - dN_i - \alpha dN_i - \beta\varepsilon_i dN_i \right] = 0.$$

Prethodnu jednačinu ćemo malo srediti:

$$\sum_i \{[\ln(g_i + N_i) - \ln N_i - \beta\varepsilon_i - \alpha]dN_i\} = 0. \qquad \text{(D-7.1.27)}$$

Izraz (D-7.1.27) jednak je nuli kad je:

$$\ln \frac{g_i + N_i}{N_i} = \alpha + \beta\varepsilon_i \Rightarrow \frac{g_i + N_i}{N_i} = e^{\alpha + \beta\varepsilon_i} \Rightarrow N_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta\varepsilon_i} - 1} . \qquad \text{(D-7.1.28)}$$

Jednačina (D-7.1.28) predstavlja Boze-Ajnštajnovu raspodelu čestica po energijama. Primenićemo je sada na fotone, kvante elektromagnetnog zračenja. Izraz o održanju energije ima tada oblik: $\Sigma N_i h\nu = E$ (h je Plankova konstanta, a ν frekvencija) dok je statistička težina g_i koja je jednaka broju stanja iste energije, ovde fotona iste energije, jednaka Rejlijevom broju koji smo izveli u poglavlju 3.1 [jednačina (3.1.20) i (3.1.24)]:

$$dn \rightarrow g_i \rightarrow \frac{8\pi\nu^2}{c^3}d\nu; \quad g_i \rightarrow \frac{8\pi}{\lambda^4}d\lambda . \qquad \text{(D-7.1.29)}$$

Uz pretpostavku da broj fotona ne mora biti stalan, broj fotona n_i (po jedinici zapremine) frekvencije ν, prema Boze-Ajnštajnovoj raspodeli (D-7.1.28) uz (D-7.1.29), je:

$$n_i = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \qquad \text{(D-7.1.30)}$$

(umesto β napisali smo *kT*, a umesto ε, *hν*). Kad izraz (D-7.1.30) pomnožimo energijom *hν* dobijamo energiju koja se emituje u okolini frekvencije *ν*:

$$u_\nu d\nu = n_i h\nu \, d\nu = \frac{8\pi h\nu^2}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu \qquad \text{(D-7.1.31)}$$

ili Plankov zakon raspodele.

Primenićemo sada Boze-Ajnštajnovu statistiku na jednoatomni gas (s parnim brojem čestica s polubrojnim spinom). Kako broj atoma u ovom slučaju mora da bude stalan, zadržaćemo konstantu α iz (D-7.1.28). Za statističku težinu g_i opet uzimamo izraz (3.1.19), što je Rejlijev broj ali ga ovog puta delimo sa 2, pa je $(g_i = 1/2\ 8\pi/\lambda^4\ d\lambda)$, jednačina (3.1.24). Podsetimo se na to da smo faktor 2, pri izvođenju Rejlijevog broja, uveli zbog polarizovanosti elektromagnetnih talasa, pa ovog puta nema potrebe da ga uračunavamo. Pod λ sada podrazumevamo De Broljijevu talasnu dužinu atoma (videti poglavlje 8.1). Podsetimo se takođe da smo Rejlijev broj odredili kao broj stojećih (elektromagnetnih) talasa u okolini frekvencije *ν* odnosno talasne dužine λ. Kako nas sada interesuje broj stanja atoma, sabiraćemo njima pridružene De Broljijeve talase što za rezultat opet daje (3.1.19) odnosno polovinu Rejlijevog broja. De Broljijeva talasna dužina je $\lambda = h/p = h/\sqrt{2\ m\varepsilon}$ (videti poglavlje 8.1), gde su *h, p,* ε*, m*, Plankova konstanta, impuls, kinetička energija i masa atoma, redom. De Broljijevu talasnu dužinu λ (i dλ) izrazićemo u funkciji kinetičke energije i odrediti *g*:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon}} \Rightarrow d\lambda = -\frac{1}{2} \frac{h}{\sqrt{2m}} \varepsilon^{-\frac{3}{2}} d\varepsilon;\ \frac{1}{\lambda^4} = \frac{(2m\varepsilon)^2}{h^4}. \qquad \text{(D-7.1.32)}$$

$$g = \frac{4\pi}{\lambda^4} d\lambda = 4\pi \frac{(2m\varepsilon)^2}{h^4} \frac{1}{2} \frac{h}{\sqrt{2m}} \varepsilon^{-\frac{3}{2}} d\varepsilon = \frac{4\pi}{h^3} \sqrt{(2m^3)}\ \varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon.$$

Sada možemo napisati Boze-Ajnštajnov zakon raspodele čestica po energijama:

$$dn = \frac{4\pi}{h^3} \sqrt{(2m^3)} \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\alpha + \frac{\varepsilon}{kT}} - 1} \qquad \text{(D-7.1.33)}$$

α se određuje izračunavanjem integrala izraza (D-7.1.33) po svim energijama. Račun pokazuje da je konstanta α kod normalnih temperatura vrlo velika, pa se 1 u imeniocu može zanemariti. Tada Boze-Ajnštajnova raspodela prelazi u Bolcmanovu:

$$dn \sim e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}.$$

Samo na najnižim temperaturama Boze-Ajnštajnova raspodela znatno odstupa od Bolcmanove pri nekim normalnim gustinama čestica. Tek na zvezdama, gde je materija vrlo gusta a i temperatura visoka, dolaze do izražaja kvantni uticaji, a raspodela čestica po energijama opisuje se Boze-Ajnštajnovim zakonom.

D-7.1.3 Fermi-Dirakova statistika

Kod čestica s polubrojnim spinom (elektroni, nukleoni) koje nazivamo fermioni treba da se uzme u obzir i Paulijev princip isključenja. Ovaj princip pokazuje da se u jednom kvantnom stanju može nalaziti samo jedna čestica što, takođe, predstavlja bitnu razliku u odnosu na klasičnu raspodelu. Verovatnoću neke raspodele proračunaćemo polazeći od sledećih principa:

a) čestice ne mogu da se razlikuju,

b) u jednom kvantnom stanju može biti samo jedna čestica.

Razdelimo prostor na oblasti koje sadrže elementarne ćelije. U i-toj oblasti sa g_i ćelija, nalazi se N_i čestica. S obzirom na to da se u jednoj ćeliji može nalaziti samo jedna čestica, broj čestica je manji ili najviše jednak broju ćelija. Zamislimo da smo čestice rasporedili po ćelijama oblasti. Nove raspodele dobijamo kad variramo indekse ćelija. Ako međusobno permutujemo pune ćelije, a njih ima N_i ne dobijamo novu raspodelu. Ne dobijamo novu raspodelu ni kad permutujemo prazne ćelije, a njih ima g_i-N_i. Ukupni broj različitih permutacija N_i čestica na g_i ćelija jednak je:

$$\frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!}$$

a ukupni broj permutacija koji daje raspodelu čestica fermiona je:

$$w_F = \prod_i \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} . \qquad \text{(D-7.1.34)}$$

Primenom Stirlingove formule odredićemo prirodni logaritam izraza (D-7.1.34):

$$\ln w_F = \sum_i [\ln g_i! - \ln N_i! - \ln(g_i - N_i)!] = \sum_i [g_i \ln g_i - N_i \ln N_i - (g_i - N_i)\ln(g_i - N_i)] . \qquad \text{(D-7.1.35)}$$

Uz uslov stalnosti broja čestica N_i i ukupne energije E, prema jednačinama (D-7.1.4) i (D-7.1.5) i pomoću metode Lagranževih multiplikatora, najverovatniju raspodelu odredićemo (kao i u slučaju Bolcmanove i Boze-Ajnštajnove satistike) iz izraza:

$$d\ln w_F - \alpha \sum_i dN_i - \beta \sum_i \varepsilon_i dN_i = 0 . \qquad \text{(D-7.1.36)}$$

Diferenciranjem izraza (D-7.1.35) i zamenjivanjem u (D-7.1.36) dobija se:

$$\sum_i \{[-\ln N_i + \ln(g_i - N_i) - \alpha - \beta\varepsilon_i] dN_i\} = 0 . \qquad \text{(D-7.1.37)}$$

Izraz (D-7.1.37) jednak je nuli za:

$$ln\frac{g_i - N_i}{N_i} = \alpha + \beta\varepsilon_i \Rightarrow \frac{g_i - N_i}{N_i} = e^{\alpha + \beta\varepsilon_i} \Rightarrow N_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta\varepsilon_i} + 1} . \qquad \text{(D-7.1.38)}$$

Broj stanja iste energije (stepen degeneracije), zbog dva moguća usmerenja spina je izraz (D-7.1.32):

$$g = \frac{8\pi}{h^3}\sqrt{(2m^3)}\varepsilon^{\frac{1}{2}}d\varepsilon \qquad \text{(D-7.1.39)}$$

i dva puta je veći kod fermiona nego kod bozona. Konačno, Fermi-Dirakova raspodela čestica po energijama ima oblik:

$$dn = \frac{8\pi}{h^3}\sqrt{(2m^3)}\frac{\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{e^{\alpha+\frac{\varepsilon}{kT}}+1}. \qquad \text{(D-7.1.40)}$$

Funkcija:

$$f = \frac{1}{e^{\alpha+\frac{\varepsilon}{kT}}+1} \qquad \text{(D-7.1.41)}$$

naziva se Fermijeva funkcija i merilo je zaposednutosti pojedinog kvantnog stanja. Umesto α uvedimo sada novu konstantu $-\varepsilon_F/kT$, gde sa F označavamo tzv. Fermijev nivo, a sa ε_F energiju ovog nivoa. Fermijeva funkcija konačno izgleda:

$$f = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}+1}. \qquad \text{(D-7.1.42)}$$

Na apsolutnoj nuli, $T = 0$, funkcija f ima osobine: $f(\varepsilon \le \varepsilon_{FO}) = 1$; $f(\varepsilon > \varepsilon_{FO}) = 0$. To znači da na apsolutnoj nuli čestice, npr. elektroni u metalu, zaposedaju kvantna stanja od najnižeg do najvišeg (Fermijevog nivoa). Svi nivoi niži od Fermijevog i zaključno s Fermijevim potpuno su ispunjeni elektronima ($f = 1$). Svi nivoi iznad Fermijevog potpuno su prazni ($f = 0$), Slika D-7.1.2. Na ordinati je prikazana funkcija f, a na apscisi energija ε. Ukupni broj elektrona n u stanjima energije od $\varepsilon = 0$ do $\varepsilon = \varepsilon_F$, na apsolutnoj nuli, jednak je integralu izraza (D-7.1.40), pri čemu je tada funkcija $f = 1$:

$$dn = \frac{8\pi}{h^3}\sqrt{2m^3}\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon \Rightarrow \int_0^n dn = n = \frac{8\pi}{h^3}\sqrt{2m^3}\int_0^{\varepsilon_F}\sqrt{\varepsilon}\,d\varepsilon = \frac{8\pi}{3h^3}\sqrt{(2m)^3}\,\varepsilon_{F0}^{3/2} \Rightarrow \qquad \text{(D-7.1.43)}$$

$$\varepsilon_{F0} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{2m}n^{2/3} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{2m}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3};\ \left(n = \frac{N}{V}\right).$$

Jednačina pokazuje da energija Fermijevog nivoa (na apsolutnoj nuli) zavisi od gustine elektrona n u provodnoj zoni metala. Izračunaćemo sada energiju Fermijevog nivoa natrijuma. Pretpostavićemo da je broj elektrona jednak broju atoma natrijuma, tj. da jedan atom daje po jedan slobodan elektron (model slobodnog elektronskog gasa). Kako je atomska masa natrijuma 23, a gustina 0,93 g/cm^3, gustina elektrona n je:

$$n = \frac{6,023\cdot 10^{23}}{V} = \frac{6,023\cdot 10^{23}}{M}\rho = 2,44\cdot 10^{22}cm^{-3} = 2,44\cdot 10^{28}m^{-3}.$$

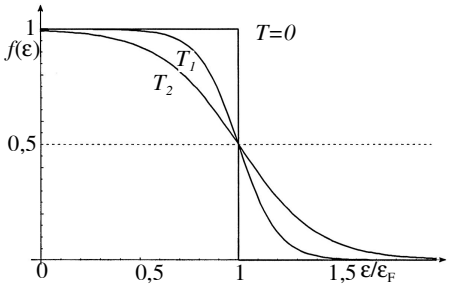
Kad se ova vrednost za n zajedno s Plankovom konstantom h (=6,626·10^{-34}J · s) i masom elektrona m (= 9,109 ·10^{-31}) zameni u (D-7.1.43), dobija se da je vrednost energije Fermijevog nivoa ε_F = 3,04 *eV.* Ova vrednost energije daleko je iznad kinetičke energije čije je merilo kT (prema zakonima ravnotežne termodinamike). Ovoliku energiju „klasičan" elektronski gas imao bi tek na 35 250 K. Dakle, „elektronski gas" u metalu nije „klasičan" gas već tipični Fermijev. Na Slici D-7.1.3 prikazana je zavisnost $dn/d\varepsilon$ kao funkcija ε, na apsolutnoj nuli, prema (D-7.1.43).

Na temperaturama iznad apsolutne nule, Fermijeva funkcije je različita od nule i za $\varepsilon > \varepsilon_F$, što govori o tome da elektroni popunjavaju nivoe i iznad Fermijevog. Energija Fermijevog nivoa je sada energija pri kojoj je vrednost Fermijeve funkcije $f(\varepsilon_F) = 0{,}5$, videti (D-7.1.42). Funkcija $f(\varepsilon_F)$, ipak, brzo teži nuli što se vidi i sa Slike D-7.1.2, pa njena vrednost pri ε-ε_F=0,1 *eV* iznosi oko 0,02 (maksimalna vrednost je 1). Na Slici D-7.1.3 prikazana je i zavisnost $dn/d\varepsilon$ kao funkcija ε, za dve temperature prema (D-7.1.40).

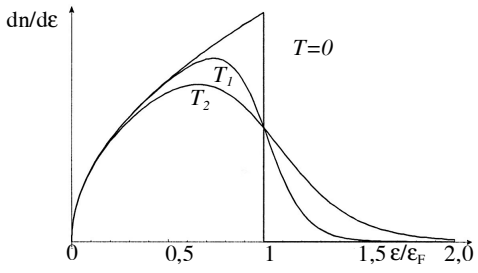
Kod provodnika, energija Fermijevog nivoa, ε_F menja se sa temperaturom po sledećem zakonu:

$$\varepsilon_F(T) = \varepsilon_{F0}\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{\varepsilon_{F0}}\right)^2\right]. \qquad \text{(D-7.1.44)}$$

Drugi član predstavlja malu popravku i iznosi oko 0,01% na sobnoj temperaturi. Dakle, možemo da zaključimo da se kod provodnika energija Fermijevog nivoa praktično **ne menja** s temperaturom.



Slika D-7.1.2 Fermijeva funkcija energije.



Slika D-7.1.3 Broj elektrona određene energije u funkciji energije, tačnije $\varepsilon/\varepsilon_F$.

Fotoelektrični efekt je pojava emisije elektrona iz metala pod dejstvom svetlosti. Otkrio ga je slučajno, još 1887. godine, R. Herc (Heinrich Rudolf Hertz, 1857––1894), izvodeći eksperimente pomoću kojih je želeo da pokaže postojanje elektromagnetnih talasa i tako potvrdi Maksvelovu elektromagnetnu teoriju. Herc je primetio da se između kuglica od cinka vrlo lako javlja varničenje kad se jedna od njih osvetli ultravioletnom svetlošću. Sledeće detaljno istraživanje fotoelektričnog efekta izveo je A. Stoletov u periodu od 1888. do 1890. godine. Koristio je uređaj kao na Slici 7.1.1, koji čini evakuisana cev u kojoj se nalazi uglačana metalna ploča vezana za negativni pol izvora napona i služi kao katoda.

Metalna mrežica bila je povezana s pozitivnim polom baterije i predstavlja anodu. Utvrđeno je da struja teče kroz galvanometar kad se katoda osvetli ultravioletnom svetlošću. Kako je sud bio evakuisan, struja je mogla nastati samo na račun naelektrisanih čestica (elektrona) izbijenih iz metala.

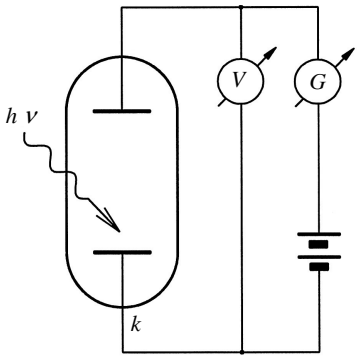
Opisana pojava jeste spoljašnji fotoefekt. Njega treba razlikovati od unutrašnjeg fotoefekta o kojem ovde neće biti govora.

Vrlo fine eksperimente vezane za fotoelektrični efekt izveo je 1902. godine Lenard (Philipp Lenard, 1862–1947; Nobelova nagrada za fiziku 1905) i na osnovu njih došlo se do saznanja da:

a) intenzitet fotostruje zavisi od intenziteta svetlosti kojom se obasjava metalna ploča odnosno katoda;

b) energija emitovanih elektrona zavisi samo od frekvencije upadne svetlosti (i s njom raste linearno) ali ne zavisi od intenziteta svetlosti;

c) postoji karakteristična, granična frekvencija za svaki metal ispod koje se, ma koliko dugo se osvetljava površina metala, ne javlja fotoefekt.



Slika 7.1.1 Aparatura za proučavanje fotoefekta. Instrument za merenje napona označen je sa *V*, a instrument za merenje struje sa *G*.

Eksperimentalnim putem dobijena saznanja o fotoelektričnom efektu trebalo je protumačiti teorijski, polazeći od važećih fizičkih zakona. Tada je to, pre svega, bila klasična elektromagnetna teorija. Očigledno je da elektroni u metalu, pod dejstvom svetlosti, dobijaju energiju potrebnu da napuste metal. S gledišta klasične elektrodinamike, to bi značilo da elektromagnetni talasi koji padaju na površinu metala izazivaju prinudne oscilacije elektrona sa amplitudama koje su proporiconalne amplitudama samih talasa. Ako sile koje zadržavaju elektrone u metalu nisu velike, očekivali bismo emisiju elektrona čije su brzine proporcionalne amplitudama upadnih elektromagnetnih talasa. Podsetićemo se na to da je energija elektromagnetnog zračenja S koja prođe kroz jediničnu površinu u jednoj sekundi [videti poglavlje 9.3 i jednačinu (9.3.4)] jednaka:

$$S = \varepsilon_0 c \mathrm{E}^2 \tag{7.1.1}$$

gde je ε_0 dielektrična konstanta vakuuma, c brzina svetlosti dok je $\mathscr{E}$ jačina električnog polja. Jednačina (7.1.1) u opštijem obliku glasi:

$$\vec{S} = \varepsilon_0 c^2 \vec{\mathrm{E}} \times \vec{B} \tag{7.1.1a}$$

gde je $\vec{S}$ Pointingov vektor a $\vec{\mathrm{E}}$ i $\vec{B}$ su vektori električnog polja i magnetne indukcije. Kod elektromagnetnih talasa važi:

$$|\vec{B}| = \frac{1}{c} |\vec{\mathrm{E}}|$$

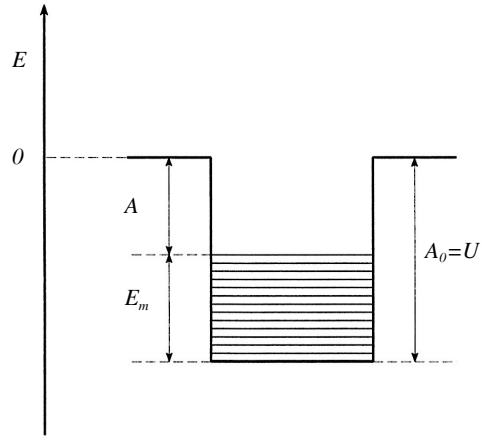
pa možemo napisati (7.1.1). Vektor električnog polja $\mathscr{E}$, prema (D-3.1.13), ima oblik:

$$\vec{\mathrm{E}} = \vec{A} e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$$

dok je njegov intenzitet $\mathrm{E} = A\cos(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ (uzima se realni deo kompleksnog broja). A je amplituda talasa, ω ugaona frekvencija, t vreme, $\vec{k}$ talasni vektor, a vek-

tor $\vec{r}$ definiše položaj tačke u ekvifaznoj ravni (videti D-3.1). Intenzitet elektromagnetnog zračenja *I*, polazeći od (7.1.1), definiše se kao srednja vrednost od $\mathrm{E}^2 \cdot \varepsilon_0 c$:

$$I = \langle S \rangle = \varepsilon_0 c \langle \mathrm{E}^2 \rangle \sim A^2 \varepsilon_0 c \ \langle \cos^2 (\omega t - \vec{k}\vec{r}) \rangle \sim A^2 \qquad (7.1.2)$$



Slika 7.1.2 Energijski nivoi elektrona u metalu. Izlazni rad *A* definiše se u odnosu na elektrone s najvećom energijom (na apsolutnoj nuli) u metalu. Horizontalne linije označavaju ukupnu energiju elektrona (zbir kinetičke *T* i potencijalne *U*).

i proporcionalan je (kvadratu) amplitude. Prema tome, prema klasičnoj teoriji očekuje se proporcionalnost između brzine, odnosno kinetičke energije emitovanih elektrona, i amplitude talasa, a kako je amplituda proporcionalna intenzitetu, jednačina (7.1.2), i intenziteta talasa. Eksperimenti, naprotiv, pokazuju da brzine emitovanih elektrona ne zavise od intenziteta upadne svetlosti, već samo od njene frekvencije. Teoriju fotoelektrčnog efekta postavlja 1905. A. Ajnštajn.

Pre nego što iznesemo detalje ovog tumačenja, reći ćemo nešto o raspodeli energije elektrona u metalu.

Elektroni u provodnoj traci metala (elektronski gas) nalaze se u potencijalnoj jami dubine *U* na različitim energijskim nivoima, Slika 7.1.2. Na apsolutnoj nuli (T=0) najviši energijski nivo zaposednut elektronima, E_{FO}, naziva se Fermijev nivo (Enrico Fermi, 1901–1954; Nobelova nagrada za fiziku 1938). Na temperaturama $T > 0K$, prema Fermi-Dirakovoj (Paul Dirac, 1902–1984, podelio sa E. Schrödingerom 1933. godine Nobelovu nagradu za fiziku) statistici, postoji verovatnoća da elektroni imaju energiju $E > E_F$ [videti D-7.1.3, npr. jednačine (D-7.1.40)–(D-7.1.44)]. Ova verovatnoća raste s porastom temperature. Na nižim temperaturama verovatnoća brzo teži nuli za energije veće od E_F. Da bi se elektron udaljio iz metala treba da mu se doda energija. Ova energija naziva se izlazni rad *A* i definiše se u odnosu na elektrone s najvećom energijom u metalu (na apsolutnoj nuli) E_m, dakle, u odnosu na Fermijev nivo i jednaka je, prema Slici 7.1.2, apsolutnoj vrednosti energije Fermijevog nivoa. Elektronima koji leže dublje u potencijalnoj jami i, prema tome, imaju manju energiju treba da se saopšti energija veća od *A*, ili kako se vidi sa slike, najviše A_0, što odgovara energiji koju treba saopštiti elektronima u najnižem nivou energije.

Vratimo se sada na Ajnštajnovu teoriju fotoelektričnog efekta. Polazeći od Plankove kvantne hipoteze, Ajnštajn iznosi pretpostavku da je elektromagnetno zračenje mlaz „čestica" kvanata, sa energijom $h\nu$, gde je h Plankova konstanta, a ν frekvencija. Godine 1926. Dž. N. Luis (Gilbert Newton Lewis, 1875–1946) uvodi izraz **foton** kao drugi naziv za kvant energije $h\nu$. Ajnštajn objašnjava fotoelektrični efekt uzajamnim dejstvom dve čestice, jednog elektrona u metalu i jednog kvanta energije $h\nu$. U takvoj interakciji, kvant energije $h\nu$ apsorbuje se u potpunosti. Ako je

energija kvanta veća od izlaznog rada A, tada elektron napušta metal s kinetičkom energijom:

$$\frac{m\upsilon_m^2}{2} = h\nu - A \Rightarrow h\nu = A + \frac{m\upsilon_m^2}{2}. \tag{7.1.3}$$

Jednačina (7.1.3) izražava zakon o održanju energije pri interakciji foton-elektron. Pre uzajamnog dejstva postojao je foton sa energijom $h\nu$ i elektron u metalu. Posle interakcije, u kojoj elektron potpuno apsorbuje foton energije $h\nu$, nastaje slobodni elektron koji ima kinetičku energiju $m\upsilon_m^2/2$ (ukoliko je $h\nu > A$). Energija A utrošena je na izlazak elektrona na površinu metala. Analizom jednačine (7.1.3) zaključujemo da:

1) fotoelektrični efekt nije moguć kad je $h\nu < A$;

2) granična, najniža frekvencija (ili, kako se još kaže, crvena granica fotoefekta) pri kojoj je još uvek fotoefekt moguć, dobija se iz uslova $h\nu = A$; u ovom slučaju kinetička energija emitovanih elektrona jednaka je nuli;

3) maksimalna kinetička energija emitovanih elektrona zavisi samo od frekvencija upadne svetlosti i linearna je funkcija frekvencije.

Pri eksperimentalnom ispitivanju fotoefekta određuje se zavisnost fotostruje od napona između emitera i kolektora. Pozitivni napon znači da je emiter katoda a kolektor anoda (kao što je naznačeno na Slici 7.1.1), pa se pri takvim naponima elektron nalazi u električnom polju koje ga ubrzava. Negativni napon znači obrnuti polaritet emitera i kolektora – emiter je sada anoda a kolektor katoda, pa na elektrone deluje usporavajuće električno polje. Kad energija usporavajućeg polja eU postane jednaka ili veća od kinetičke energije elektrona s maksimalnom kinetičkom energijom, elektroni „oslobođeni" iz metala dejstvom svetlosti, ne mogu da pređu put od emitera do kolektora zbog dejstva usporavajućeg polja i fotostruja I opada do nule:

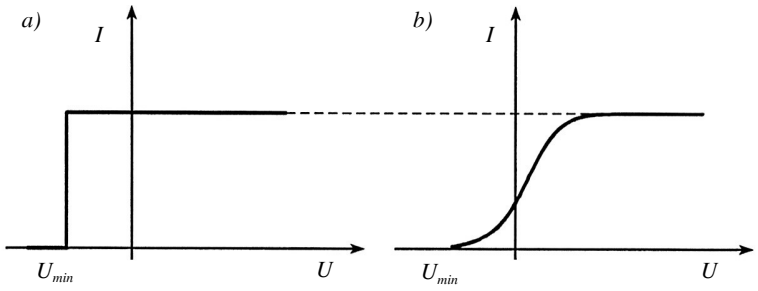
$$eU \geq \frac{m\upsilon_m^2}{2} \Rightarrow I = 0.$$

Tako je minimalni usporavajući napon dovoljan da zaustavi tok fotostruje i merilo maksimalne kinetičke energije elektrona ($\varepsilon_m = eU_{min}$). Kad bi svi oslobođeni elektroni imali istu brzinu, pa prema tome i istu kinetičku energiju ε, zavisnost jačine fotostruje od napona između emitera i kolektora imala bi oblik kao na Slici 7.1.3a. Međutim, obično se ne dobija ovakvo naglo smanjenje jačine struje već tok zavisnosti jačine fotostruje od napona između elektroda ima oblik kao na Slici 7.1.3.b. Jačina fotostruje postepeno slabi pošto elektroni napuštaju površinu metala različitim brzinama odnosno kinetičkim energijama, a njihov broj određen je Fermi-Dirakovom raspodelom. Jačina struje proporcionalna je broju elektrona n koji stignu do kolektora, a do kolektora pri usporavajućem naponu U stižu svi elektroni sa energijom koja je jednaka ili veća od $eU = \varepsilon$:

$$I \sim \int_{\varepsilon}^{\infty} dn \Rightarrow \frac{dI}{d\varepsilon} = \frac{1}{e}\frac{dI}{dU} \sim \varepsilon^{1/2} f_F \tag{7.1.4}$$

gde je n broj elektrona, indeks F označava da je raspodela po energijama Fermi-Dirakova, f je Fermijeva funkcija [videti jednačinu (D-7.1.40)]. Sama raspodela može

da se rekonstruiše diferenciranjem, eksperimentalnim putem dobijene krive $I = \varphi(U)$ kao što je označeno jednačinom (7.1.4). Tada postoji mogućnost da se odredi razlika Δ između maksimalne energije elektrona ($I = 0$) na nekoj temperaturi T i one koja odgovara Fermijevom nivou (za $\varepsilon = \varepsilon_F$, Fermijeva funkcija $f = 0{,}5$) a izlazni rad, prema (7.1.3), obračuna u odnosu na Fermijev nivo.

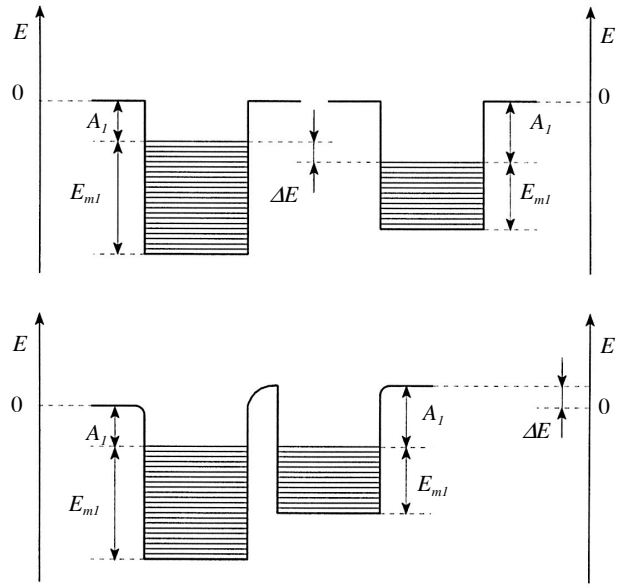


Slika 7.1.3 Jačina fotostruje u funkciji napona: a) zavisnost jačine fotostruje od napona između kolektora i emitera u hipotetičkom slučaju kad svi elektroni imaju istu energiju; b) zavisnost jačine fotostruje od napona između kolektora i emitera u stvarnom slučaju.

Opisaćemo sada eksperiment koji je izveo R. Milken tokom 1916. i za to doba izvršio strogu eksperimentalnu proveru Ajnštajnove jednačine za fotoelektrični efekt. Napomenimo to da je tek deset godina kasnije, 1926. godine, formulisana Fermi-Dirakova statistika. Provera se sastojala u određivanju maksimalne kinetičke energije emitovanih elektrona pri različitim frekvencijama upadne svetlosti. Pri tome, maksimalna kinetička energija fotoelektrona može da se izrazi kao proizvod naelektrisanja elektrona e i najmanjeg usporavajućeg napona U_{min} koji je potreban da zaustavi tok fotoelektrona sa emitera ($\varepsilon_m = eU_{min}$). Ovaj napon trebalo je da se eksperimentalno odredi.

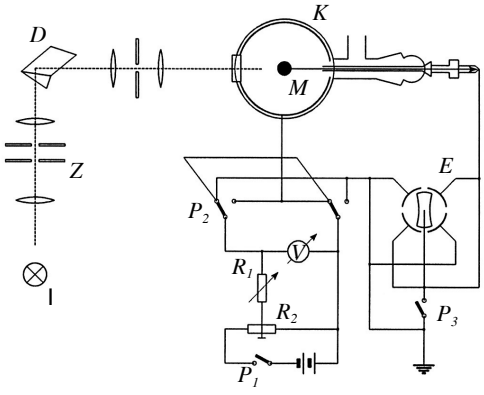
Pri proveri Ajnštajnove jednačine maksimalnu kinetičku energiju oslobođenih fotoelektrona trebalo je što tačnije odrediti, što nije bilo jednostavno iz dva razloga. Prvo, kriva zavisnosti jačine fotostruje od napona ne preseca apscisnu osu već joj se asimptotski približava, pa je vrednost minimalnog usporavajućeg napona u izvesnoj meri neodređena. Drugo, zbog neizbežnog postojanja kontaktne razlike potencijala između elektroda u aparaturi, Slika 7.1.4, kriva treba da se translatorno pomeri za vrednost ovog potencijala, a njega nije lako odrediti. Zbog toga se prilično dugo čekalo na eksperimentalnu potvrdu Ajnštajnove jednačine.

Pri ovakvom merenju koristi se metoda sfernog kondenzatora. Zbog posebnosti kretanja elektrona u električnom polju ovakvog kondenzatora, gde jednu elektrodu čini mala metalna kuglica a drugu sferna metalna obloga, kriva zavisnosti jačine fotostruje od napona strmo se spušta, pa se napon, potreban da zaustavi tok emitovanih elektrona, može vrlo tačno odrediti. Na Slici 7.1.5. prikazana je šema eksperimentalnog uređaja. Monohromatska svetlost, kroz kvarcni prozorčić, dospeva u evakuisani balon S, čija posrebrena unutrašnja strana predstavlja spoljnju oblogu kondenzatora. Metalna kulgica M je od ispitivanog materijala (na primer, od cinka) i služi kao unutrašnja obloga. Potenciometrom R uspostavlja se određeni napon u kondenzatoru. Ovaj napon meri se voltmetrom V. Potencijal kuglice meri se elektrometrom E. Kuglica se osvetljava svetlošću različitih talasnih dužina, a kao



Slika 7.1.4 Metali 1 i 2 razlikuju se u dubini potencijalne jame a samim tim i u broju energijskih stanja elektrona. Kad se metali spoje, nastaje izjednačavanje nivoa najviše energije, a kontaktna razlika potencijala jednaka je razlici izlaznih radova.

rezultati merenja dobijaju se krive date na Slici 7.1.6a i 7.1.6b. Da bi se sprečila emisija elektrona sa kolektora (sferne metalne obloge), na njega se nanosi metal koji ima daleko veći izlazni rad, u ovom slučaju srebro.



Slika 7.1.5 Šema eksperimentalnog uređaja koji je koristio Miliken pri proveri Ajnštajnove jednačine za fotoefekt. Optički deo sastoji se i od izvora polihromatske svetlosti *I*, blende *Z* i disperzionog elementa *D*. Svetlost izabrane talasne dužine pada na kuglicu od ispitivanog materijala *M*, koja sa slojem *K* čini obloge kondenzatora. Na obloge se dovodi napon koji može da se menja pomoću otpornika R_1 i R_2. Preklopnik P_2 služi za menjanje polariteta. Struja koja protiče kroz kolo meri se kvadrant-elektrometrom *E* koji je spojen u idiostatičkom spoju (bez pomoćnog izvora).

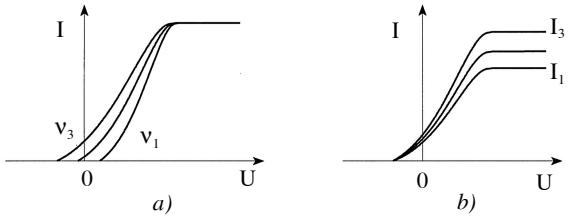
Pri određenoj potencijalnoj razlici krive počinju da opadaju i nezavisno od upotrebljene talasne dužine svetlosti. Ova potencijalna razlika upravo je jednaka kontaktnoj razlici potencijala, koja se određuje bez posebnih merenja. Preseci krivih *I* sa apscisom *U* određuju vrednosti:

U_{1min} za frekvenciju svetlosti ν_1
U_{2min} za frekvenciju svetlosti ν_2

gde je $\nu_1 < \nu_2$.

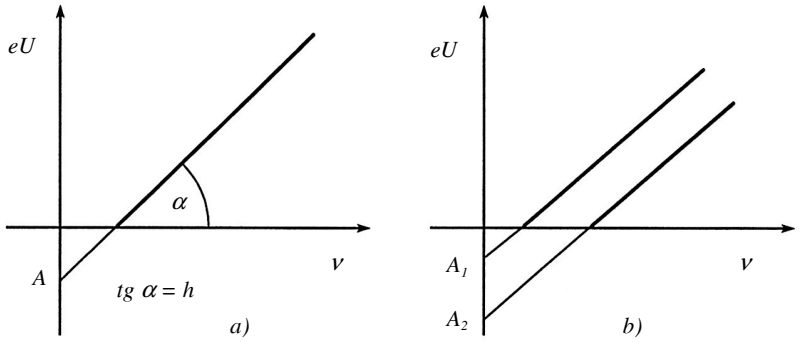
Prema tome[9]:

$eU_1 = m\upsilon_1^2/2$ za frekvenciju ν_1
$eU_2 = m\upsilon_2^2/2$ za frekvenciju ν_2.



Slika 7.1.6 Zavisnost jačine fotostruje od napona između emitera i kolektora: a) pri osvetljavanju emitera svetlošću različitih frekvencija; b) pri osvetljavanju emitera svetlošću iste frekvencije a različitih intenziteta.

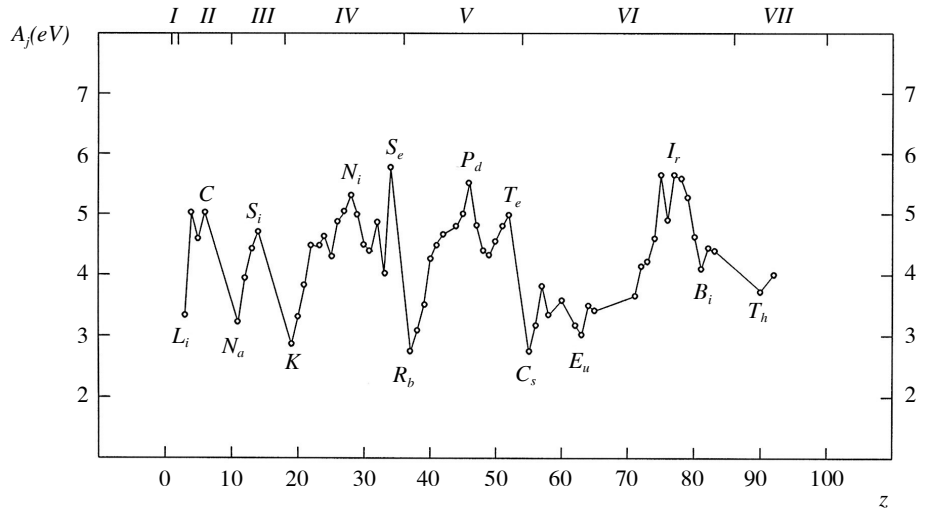
Rezultati merenja pokazuju da maksimalna kinetička energija elektrona raste s porastom frekvencije. Kad se vrednosti minimalnih usporavajućih napona pri kojima se zaustavlja tok emitovanih elektrona, predstave u zavisnosti od ν, dobija se prava kao na Slici 7.1.7a. Iz nagiba prave može da se odredi vrednost Plankove konstante ($h = e\ \mathrm{tg}\alpha$). Prava $U = f(\nu)$ seče U-osu, a iz veličine ovog odsečka može da se izračuna vrednost izlaznog rada za konkretni metal. Na Slici 7.1.7 b) prikazane su prave koje predstavljaju fotoelektrični efekt sa dva različita metala, a na Slici 7.1.8 prikazane su vrednosti izlaznih radova u zavisnosti od rednog broja.



Slika 7.1.7 Zavisnost minimalnog usporavajućeg napona, tačnije, eU, između emitera i kolektora (potrebnog da zaustavi tok emitovanih elektrona) od frekvencije upadne svetlosti: a) za jedan metal; b) za dva različita metala.

Izlazni rad elektrona iz metala manji je od energije jonizacije slobodnih atoma. To znači da su elektroni u metalima slabije vezani. Metali s manjim energijama jonizacije imaju i manji izlazni rad elektrona. Izlazni rad elektrona zavisi od kristalne strukture metala. Dakle, metali koji kristališu u različitim kristalnim oblicima imaju i različite izlazne radove za svaki od ovih oblika. Hemijski postojani me-

[9] Uz eU_1 odnosno $m\upsilon^2/2$ izostavljeni su indeksi *min.* odnosno *max.*



Slika 7.1.8 Zavisnost izlaznog rada od rednog broja.

tali, npr. platina, imaju veliki izlazni rad elektrona, oko 10 *eV*, dok alkalni metali imaju najmanje vrednosti izlaznih radova (od 3 do 4 *eV*-a).

7.2 *X*-ZRAČENJE

Rendgensko ili *x*-zračenje otkrio je 1895. godine V. K. Rendgen (Wilhelm Conrad Röntgen, 1845–1923, godine 1901. dobio je Nobelovu nagradu za fiziku za ovo otkriće) ispitujući luminiscenciju pod uticajem katodnih zraka (brzih elektrona) u cevima za pražnjenje. Rendgen je zapazio da novo, do tada nepoznato zračenje, takođe, izaziva jaku luminiscenciju nekih supstancija, kao što su cinksulfid, cinksilikat, barijum-platinocijanid. U ovim prvim eksperimentima rendgensko zračenje dolazilo je sa zidova cevi za pražnjenje kao posledica udara elektrona o njih. Međutim, još jače zračenje nastaje kad se na put elektronskog mlaza postavi komad metala (antikatoda) koji tada, pod dejstvom udara brzih elektrona, emituje zračenje.

Neka od važnih svojstava rendgenskog zračenja uočio je sam Rendgen. Pored luminiscencije, *x*-zraci izazivaju i jonizaciju sredine kroz koju prolaze i deluju na fotoploču. Odlikuju se velikom prodornošću a ne skreću u električnom i magnetnom polju, što je isključivalo mogućnost da je reč o naelektrisanim česticama. Kako se o prirodi tog zračenja nije tada mnogo znalo sam Rendgen nazvao ga je *x* (nepoznato) zračenje.

Danas se zna da rendgenski zraci nastaju usporavanjem snopa brzih elektrona, odnosno elektrona velike energije. Nastaju u evakuisanim cevima (za pražnjenje) kakve je otprilike koristio i Rendgen, a u kojima se naspram katode postavlja metalna anoda (antikatoda). Zagrevanjem katode iz nje se emituju elektroni. Pod dejstvom visokog napona od nekoliko desetina, pa i stotina hiljada volti koji se uspostavlja u cevi, ovi elektroni se ubrzavaju i usmeravaju na antikatodu, sa koje se emituje rendgensko zračenje, Slika 7.2.1.

Po svojoj prirodi rendgenski zraci su elektromagnetni talasi čija je talasna dužina mnogo manja od talasne dužine vidljive svetlosti i kreće se u opsegu od 10 nm do 0,01 nm. To odgovara energijama *x*-fotona od 1 keV do 100 keV. *X*-zraci pokazuju inferferenciona i difrakciona svojstva, karakteristična za sve talase. Spektar *x*-zračenja može da ima neprekidni (kontinualni, slično „beloj" svetlosti) ili linijski (diskretni) spektar – tada se govori o karakterističnom rendgenskom zračenju.

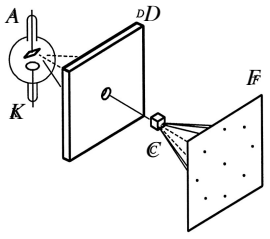
7.2.1 Difrakcija *x*-zračenja na kristalnoj rešetki

Talasna priroda *x*-zračenja nedvosmisleno je dokazana eksperimentima difrakcije na kristalnoj rešetki. Talasi pokazuju pojavu difrakcije pri prolasku kroz uzanu pukotinu čije su dimenzije reda veličine talasne dužine upotrebljenog zračenja.

Početkom 1912. godine, čuveni nemački naučnik Maks fon Laue (Max von Laue, 1879–1960, dobio Nobelovu nagradu za fiziku 1914. godine za otkriće difrakcije *x*-zračenja na kristalima), predložio je da se *x*-zračenje propusti kroz kristal i pokaže difrakcija *x*-zračenja na kristalima. Da bi se razumela genijalnost ove ideje treba da znamo da 1912. godine talasna priroda rendgenskog zračenja nije bila u potpunosti dokazana, a njegova talasna dužina bila je samo približno poznata.

Teorija o strukturi kristala bila je u to vreme samo hipoteza, mada je još 1824. godine L. A. Zeber (L. A. Seber), nemački fizičar, pretpostavio da su atomi u kristalima poređani u središnjim tačkama određenih geometrijskih tela, dok je 1848. godine francuski naučnik A. Brave (A. Bravais) dao predstavu o kristalnoj rešetki u obliku koji je kasnije prihvaćen.

Teorija kristala zasnovana je na predstavi kristalne rešetke. Zamislićemo kristalnu rešetku kao skup tačaka pravilno raspoređenih u prostoru. Mrežom pravih ove tačke mogu da se povežu, čime se zapremina kristalne rešetke deli na niz jediničnih ćelija koje imaju oblik nekog geometrijskog tela. Ako svaku tačku kristalne rešetke zamenimo identičnim atomom, jonom ili grupom atoma, dobijamo kristalnu strukturu. Naglašavamo, dakle, da je rešetka mreža tačaka, a u kristalnoj strukturi svaka tačka rešetke zamenjena je materijalnim jedinicama ili izgrađivačkim česticama kristala.



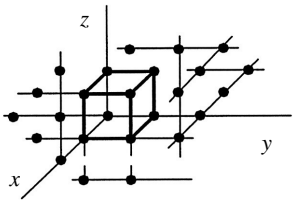
Slika 7.2.1 Laueova metoda za difrakciju *x*-zračenja na kristalnoj rešetki. Snop polihromatskog *x*-zračenja sa antikatode *A* fokusira se pomoću debelog zaklona *D*, difraktuje na kristalu *C* i ostavlja na fotoploči *F* tragove rasutog *x*-zračenja.

Maks von Laue je pretpostavio da kristal može da deluje kao prirodna optička rešetka. Materijalni centri kristala tada odgovaraju narezima, a njihova međusobna rastojanja pukotinama rešetke. Potreban uslov za difrakciju jeste da red veličine međuatomskog rastojanja u kristalu odgovara redu veličine talasne dužine *x*-zračenja. Fizičari Volter Fridrih (Walter Friedrich) i Paul Kniping (Paul Knipping) prihvatili su da eksperimentalno ostvare Laueove zamisli. Sam Max von Laue pisao je o tome: *„Bilo je potrebno malo diplomatije da se Fidrih i Kniping oslobode sumnji u pog-*

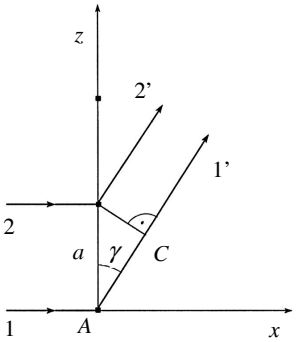
ledu uspeha eksperimenta i izvedu ga, najpre sa sasvim jednostavnim sredstvima, po mom planu. Kao kristal služio je bakarni sulfat, jer se od njega lako mogu dobiti pogodni i pravilni komadi. Pravac propuštanja zrakova prepustili smo slučaju. Na fotografskoj ploči iza kristala, prvi put su se, pored traga primarnog zraka koji je dolazio neposredno od antikatode, pojavili tragovi skrenutih zrakova, dakle očekivani spektri rešetke... Teorija je zapravo već bila gotova prenošenjem sa obične na recipročnu rešetku i tako je Zomerfeld mogao 8. juna 1912. podneti Minhenskoj akademiji zajednički rad Fridriha, Knipinga i moj o interferenciji rendgenskih zrakova koji je osim teorije sadržavao i niz karakterističnih snimaka."

Fridrih i Kniping ozračivali su *x*-zračenjem prvo kristal plavog kamena, a zatim i druge kristale. Kako se mali deo upadnog zračenja difraktuje, trebalo je da se kristal ozračuje više sati da bi se na fotoploči dobili tragovi difraktovanog snopa. Rezultat tog eksperimenta bili su tzv. Laueovi dijagrami koje je kvantitativno proučio sam Laue. Na njima se vidi raspored čestica kristala sa kojih se rasejava zračenje (slika recipročne rešetke), pa je ovim eksperimentima ne samo dokazana talasna priroda *x*-zračenja već je i hipoteza o kristalnoj rešetki podignuta na nivo sigurne, eksperimentalno ispitane kristalografske teorije. Pomoću Laueove interferencije pošlo je za rukom engleskim naučnicima, ocu i sinu Henriju i Lorensu Bragu (Henry Bragg, 1862–1942; Lawrence Bragg, 1890–1971; podelili Nobelovu nagradu za fiziku 1915. za analizu kristalnih struktura pomoću *x*-zračenja) da odrede talasnu dužinu rendgenskog zračenja i dimenzije kristalne rešetke. Laueovo otkriče imalo je veliki značaj za nauku o atomu, jer su eksperimenti difrakcije *x*-zračenja omogućili da se atomi „vide".

Razmotrimo sada detaljnije difrakciju *x*-zračenja na kristalnoj rešetki i nastajanje odgovarajuće difrakcione slike na zaklonu (fotoploči), tzv. Laueovom metodom, Slika 7.2.1.

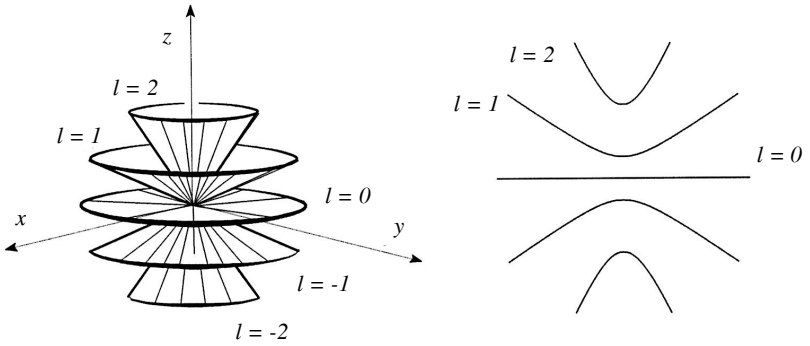


Slika 7.2.2 Kristal u koordinatnom sistemu.



Slika 7.2.3 Jednodimenziona rešetka na kojoj se difraktuje *x*-zračenje koje dolazi iz pravca *x*-ose. 1 i 2 su upadni, a 1′ i 2′ difraktovani zraci.

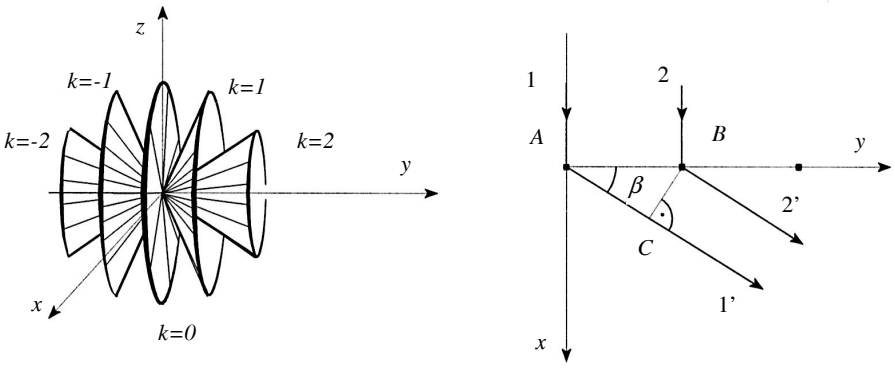
Uzani snop *x*-zraka, dobijen prolaskom *x*-zračenja iz rendgenske cevi kroz mali otvor na debelom zaklonu, pada na kristal i zatim na fotoploču. Na fotoploči nastaje difrakciona slika koja se sastoji iz središnje mrlje, koju izaziva upadni snop *x*-zračenja, i izvesnog broja mrlja koje su simetrično raspoređene oko središnje mrlje. Poreklo ovakve difrakcione slike najlakše može da se shvati ako se pretpostavi da upotrebljeni kristal ima kubnu strukturu. Izabraćemo pravougli koordinantni sistem sa osama paralelnim osama kristala, Slika 7.2.2. Pretpostavimo da su izgrađivačke čestice kristala raspoređene duž zamišljenih linija, paralelnih koordinantnim osama. Neka upadni snop *x*-zračenja pada na kristal u smeru koji se poklapa s pozitivnim smerom *x*-ose.



Slika 7.2.4 Difrakcija na jednodimenzionoj kristalnoj rešetki postavljenoj u pravcu *z*-ose (levo): *x*-zraci određene talasne dužine λ pri određenom redu difrakcije *l,* nastali difrakcijom polihromatskog *x*-zračenja na jednodimenzionoj kristalnoj rešetki čije tačke leže duž *z*-ose, prostiru se pod određenim uglom u odnosu na *z*-osu. To znači da leže na obvojnici konusa čija je osa paralelna *z*-osi; (desno): difrakcione slike na zaklonu imaju oblik hiperbola (presek konusa sa ravni zaklona, koji je postavljen pararelno *yz*-ravni, je hiperbola).

Da bismo razumeli nastajanje difrakcione slike, posmatrajmo prvo međudejstvo *x*-zračenja s jednodimenzionom rešetkom čije su čestice raspoređene duž *z*-ose na međusobnom rastojanju *a*, Slika 7.2.3. *x*-zračenje (zraci *1* i *2*) pada na kristal pod uglom $\gamma_0 = 90°$ a čestice kristala postaju centri rasejavanja. One rasejavaju zračenje u svim pravcima, a rasejani talasi međusobno interferišu, pri čemu može da dođe do njihovog poništavanja ili pojačavanja. Prema zakonima optike, da bi se pojavio difrakcioni maksimum, svi pristigli talasi moraju da budu u fazi, pa do konstruktivne interferencije dva talasa dolazi ako je njihova putna razlika jednaka celobrojnom umnošku talasnih dužina λ. Prema Slici 7.2.3, putna razlika δ difraktovanih zraka *1′* i *2′* je:

$$AC = \delta = a\cos\gamma = l\lambda \qquad (7.2.1)$$



Slika 7.2.5 Difrakcija na jednodimenzionoj kristalnoj rešetki (levo): difraktovani zraci (za dato λ) različitih redova difrakcije *k*, leže po obvojnicama konusa; (desno): difrakcija *x*-zračenja sa jednodimenzione rešetke postavljene u pracu *y*-ose. 1 i 2 su upadni, a 1′ i 2′ su difraktovani zraci.

gde je l = ..., -2, -1, 0, +1, +2, ...

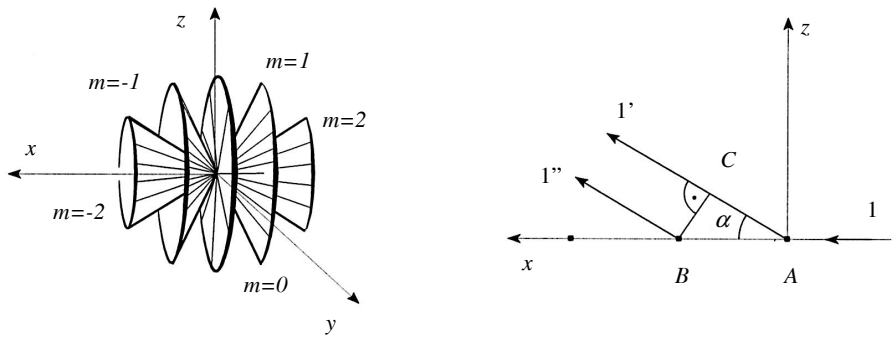
Uslov (7.2.1) je uslov za konstruktivnu interferenciju i daje pravce difrakcionih maksimuma, određenog reda difrakcije, za određenu talasnu dužinu λ. Ove prave leže na obvojnicima konusa čija je osa paralelna z-osi, a ugao otvora 2γ. Za različite vrednosti broja l (viši redovi difrakcije) pri istoj talasnoj dužini λ, dobijaju se konusi različitih otvora. Ako se na nekom rastojanju od linijske rešetke postavi fluorescentni ekran ili fotoploča (npr. u ravni paralelnoj yz-ravni), tragovi interferencionih konusa na zaklonu imaju oblik hiperbola, Slika 7.2.4 (desno). Posmatrajmo sada interakciju zračenja s jednodimenzionom kristalnom rešetkom čije su tačke postavljene u pravcu y-ose, Slika 7.2.5. Zraci *1* i *2* padaju na kristal pod uglom $\beta_0 = 90°$ u odnosu na y-osu (iz x-pravca). Čestice kristala rasejavaju ih u svim pravcima ali samo zraci koji su rasejani pod uglom β zadovoljavaju uslov za konstruktivnu interferenciju. Putna razlika difraktovanih zrakova *1´* i *2´* data je sledećom jednačinom:

$$\delta = AC = AB\cos\beta$$

gde je $a(=AB)$ konstanta rešetke. Uslov za konstruktivnu interferenciju glasi:

$$a\cos\beta = k\lambda \qquad (k = ..., -2, -1, 0, +1, +2, ...) \tag{7.2.2}$$

gde je k ceo broj, a β ugao koji zaklapaju difraktovani zraci sa y-osom. Uslov (7.2.2) zadovoljavaju svi zraci raspoređeni na konusima čije su ose paralelne y-osi sa otvorima 2β za k = 1 (2, 3...) i -1 (-2, -3 ...). Tragovi ovih konusa na zaklonu postavljenom paralelno yz-ravni opet su hiperbole.



Slika 7.2.6 Difrakcija x-zračenja na jednodimenzionoj kristalnoj rešetki (desno): difrakcija x-zračenja sa jednodimenzione rešetke postavljene u pravcu x-ose. 1 je upadni zrak, a 1′ i 1″ su difraktovani zraci; (levo): difraktovani zraci (za dato λ) različitih redova difrakcije m, leže po obvojnicama konusa.

Posmatrajmo sada slučaj kad zračenje iz pravca x-ose pada na dvodimenzionu kristalnu rešetku čije su tačke raspoređene duž z-ose i y-ose. Tada se difrakcioni maksimumi javljaju u pravcima koji istovremeno zadovoljavaju uslove (7.2.1) i (7.2.2). Difrakciona slika na zaklonu postavljenom paralelno yz-ravni sastoji se iz mrlja koje geometrijski odgovaraju mestima preseka već pomenutih hiperbola. Svaka mrlja na zaklonu određena je parom brojeva l i k za svako λ. Na ovaj način ravanska rešetka razlaže kontinualno zračenje u spektar.

Da bismo razmotrili difrakciju *x*-zračenja na trodimenzionoj kristalnoj rešetki posmatraćemo i interakciju *x*-zračenja, Slika 7.2.6, koje opet dolazi iz pravca *x*-ose (pa je ugao koji zaklapa upadni snop sa *x*-osom $\alpha_0 = 0$), s jednodimenzionom kristalnom rešetkom. Tačke leže duž *x*-ose a konstanta rešetke opet je *a*. Čestice kristala rasejavaju zračenje u svim pravcima, ali samo zraci rasejani pod uglom α zadovoljavaju uslov konstruktivne interferencije. Putna razlika između difraktovanih zrakova *1´* i *2´* je:

$$\delta = AB - AC = a - a\cos\alpha = a(1 - \cos\alpha)$$

a uslov za konstruktivnu interferenciju glasi:

$$a(1 - \cos\alpha) = m\lambda \qquad (m = ..., -2, -1, 0, +1, +2, ...). \tag{7.2.3}$$

Ovaj uslov zadovoljavaju zraci raspoređeni po obvojnici konusa čija je osa paralelna *x*-osi, a otvor konusa je 2α za $m = +1$ (2, 3...) i -1 (-2, -3 ...). ili -1. Linije preseka ovih konusa sa ravni zaklona, koji je postavljen paralelno *zy*-ravni, su krugovi.

Kako sada izgleda difrakciona slika na zaklonu posle difrakcije na trodimenzionoj kristalnoj rešetki? Uslovi (7.2.1), (7.2.2) i (7.2.3) moraju da budu zadovoljeni istovremeno. To znači da se na zaklonu pojavljuju difrakcione mrlje u tačkama preseka kružnica s hiperbolama, Slika 7.2.7, što je ispunjeno samo za određeno λ. Nađimo ovu talasnu dužinu. Iz (7.2.1), (7.2.2) i (7.2.3) dobija se:

(7.2.1´) $$\cos\gamma = \frac{l\lambda}{a}$$

(7.2.2´) $$\cos\beta = \frac{k\lambda}{a}$$

(7.2.3´) $$\cos\alpha = 1 - \frac{m\lambda}{a}.$$

Uglovi α, β i γ povezani su jednačinom:

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1. \tag{7.2.4}$$

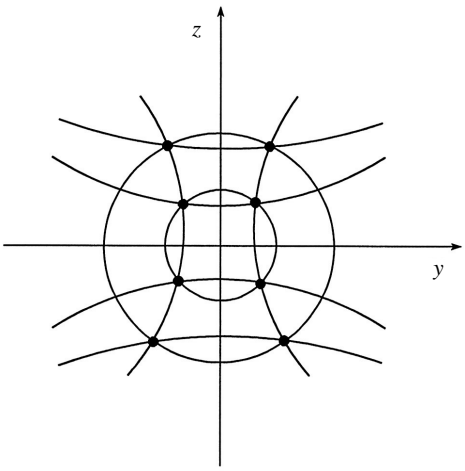
Jednačine (7.2.1´), (7.2.2´) i (7.2.3´) dignu se na kvadrat, saberu i iskoristi se uslov (7.2.4):

$$1 = \frac{l^2\lambda^2}{a^2} + \frac{k^2\lambda^2}{a^2} + \frac{m^2\lambda^2}{a^2} + 1 - \frac{2m\lambda}{a}$$

ili:

$$\lambda\left[\lambda\left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{k^2}{a^2} + \frac{m^2}{a^2}\right) - \frac{2m}{a}\right] = 0$$

$$\lambda = 2a\frac{m}{l^2 + k^2 + m^2}. \tag{7.2.5}$$



Slika 7.2.7 Interferenciona slika na zaklonu kao rezultat difrakcije *x*-zračenja na trodimenzionoj kristalnoj rešetki. Dva skupa hiperbola i familija krugova rezultat su preseka konusa, duž kojih leže rasejani zraci, sa ravni ekrana (ravan paralelna *yz*-ravni). Interferencione mrlje nastaju samo u tačkama preseka odgovarajućih hiperbola i kružnica, saglasno matematičkom uslovu 7.2.5.

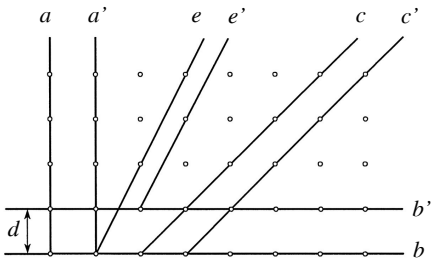
Znači, pri zadatom upadnom uglu zračenja (u našem slučaju $\gamma_0 = \beta_0 = 90°$ i $\alpha_0 = 0°$) difrakcioni maksimum određenog reda u određenom pravcu (α, β, γ) javlja se za talasnu dužinu koja je određena jednačinom (7.2.5). Napomenimo da uslovi (7.2.1), (7.2.2) i (7.2.3) zahtevaju da je $\lambda < a$. Međutim, λ ne sme da bude mnogo manje od konstantne rešetke *a* jer su tada i uglovi, α, β i γ vrlo mali pa se difrakcija teško zapaža. U Laueovoj metodi, kristali se ozračuju polihromatskim *x*-zračenjem, u čijem se kontinualnom spektru uvek nalaze talasi s talasnom dužinom λ koja zadovoljava jednačinu (7.2.5).

7.2.2 Bragov metod difrakcije *x*-zračenja na kristalima

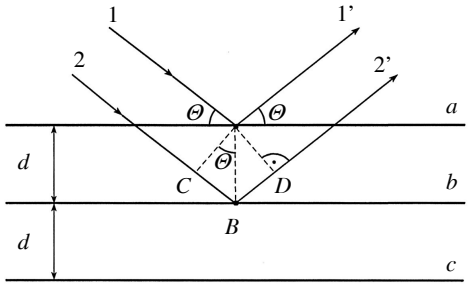
Fizičari Henri i Lorens Brag, protumačili su pojavu rasejavanja *x*-zračenja na kristalnoj rešetki kao refleksiju sa ravni kristala koje na zračenje deluju poput ogledala. U skladu s ovom interpretacijom oni su postavili i odgovarajući uslov neophodan za pojačavanje (konstruktivna interferencija) reflektovanog zračenja. Radom H. i L. Braga postavljene su osnove analize strukture kristala rendgenskim zračenjem.

Prema ovoj zamisli smatra se da tačke kristalne rešetke pripadaju sistemima međusobno paralelnih ravni koje, kada se projektuju na ravan slike, daju prave, Slika 7.2.8. Te ravni mogu da budu različito usmerene u prostoru. Sistemi ravni razlikuju se u broju atoma pa jedinici površine *a* date ravni i po rastojanju *d* (između paralelnih ravni). Veličina *a/d* je konstanta za određeni sistem paralelnih ravni i jednaka je broju atoma po jedinici zapremine kristala.

Izvešćemo sada Bragov uslov za konstruktivnu interferenciju. Neka na kristal pada snop monohromatskog *x*-zračenja pod uglom θ u odnosu na sistem paralelnih ravni sa kojih se zračenje reflektuje. Ove ravni, u ravni slike ostavljaju tragove u vidu paralelnih pravih, *a, b, c*, Slika 7.2.9. Atomi (joni ili molekuli) koji čine kristal rasejavaju zračenje u svim pravcima. Nas zanima pod kojim uglovima dolazi do konstruktivne interferencije reflektovanog zračenja, dakle do onog koje je rasejano u pravcu θ. Ako posmatramo samo ravan *a*, Slika 7.2.9. vidi se da se za bilo koju talasnu dužinu λ upadnog zračenja dobija konstruktivna interferencija rasejanog zračenja kad je ugao jednak uglu θ, jer su putne dužine za sve zrake međusobno



Slika 7.2.8 Tragovi sistema paralelnih ravni.



Slika 7.2.9 Uz izvođenje Bragovog uslova za konstruktivnu interferenciju.

jednake. Možemo, prema tome, da smatramo da se snop reflektovao sa ravni *a*. Međutim, deo upadnog snopa prolazi dalje kroz kristal, pa se reflektuje i sa ravni *b*, *c*, itd. Zraci *1´* i *2´* reflektovani ovim ravnima međusobno interferišu. Pri tome, dolazi do pojačavanja odnosno do konstruktivne interferencije samo onih zrakova čija je razlika puteva jednaka celobrojnom umnošku talasnih dužina. Putna razlika zrakova *1´* i *2´* reflektovanih sa ravni *a* i *b* je:

$$\delta = CB + BD = 2d\sin\theta$$

pa je Bragov uslov za konstruktivnu interferenciju dat jednačinom:

$$2d\sin\theta = n\lambda \tag{7.2.6}$$

gde je d rastojanje između paralelnih ravni, θ ugao između upadnog (i reflektovanog) snopa i ravni kristala, a n je ceo broj. Bragov uslov daje pravac difrakcionog maksimuma za određenu familiju paralelnih ravni i talasnu dužnu λ i za dati red difrakcije n, u Bragovoj ravni određenoj pravcem upadnog i reflektovanog zraka. I Laueov i Bragov izraz za konstruktivnu interferenciju u osnovi su ekvivalentni. Prema Laueovom tumačenju, zračenje pada na kristal pod uglom α_0 i dolazi do difrakcije, Slika 7.2.10. Difraktovani zraci *1´* i *2´* se pojačavaju ako su u fazi, tj. ako je njihova putna razlika jednaka celobrojnom umnošku talasnih dužina. Sa Slike 7.2.10 putna razlika δ je:

$$\delta = AC - BD = a\cos\alpha - a\cos a_0 = a(\cos\alpha - \cos\alpha_0)$$

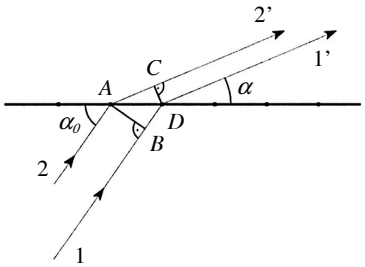
i kad je $\alpha_0 = 90°$ sledi da je Laueov uslov za konstruktivnu interferenciju:

$$\delta = AC - BD = a\cos\alpha = n\lambda. \tag{7.2.7}$$

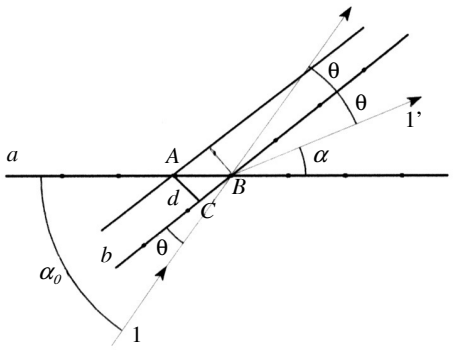
Prema Bragovom tumačenju, difrakciju shvatamo kao refleksiju sa određenog sistema ravni, Slika 7.2.11.

Tako zrak 1, koji u odnosu na ravan *a* pada pod uglom α_0 a difraktuje se pod uglom α, zaklapa sa ravni *b* ugao θ pod kojim se i reflektuje sa nje. Ravan *b* je jedna u nizu pararelnih mrežnih ravni na međusobnom rastojanju *d*. Iz malog trougla *ABC* sledi da je:

$$\sin(\alpha_0 - \theta) = \sin(90 - \theta) = \cos\theta = \frac{d}{a}. \tag{7.2.8}$$



Slika 7.2.10 Difrakcija na jednodimenzionoj rešetki.



Slika 7.2.11 Zrak 1 se u odnosu na ravan *a* difraktuje dok se u odnosu na ravan *b* reflektuje.

Veličina *a* iz (7.2.8) zameni se u (7.2.7) i uzme se u obzir da je:

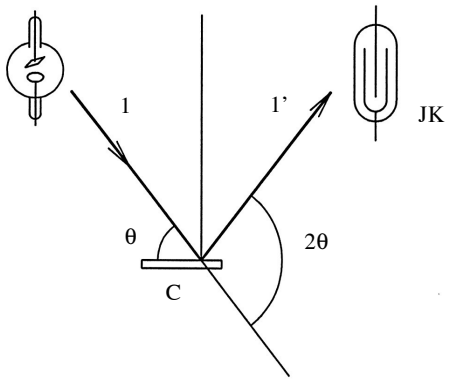
$$\alpha_0 = 2\theta + \alpha \quad \Rightarrow \quad \alpha = \alpha_0 - 2\theta = 90 - 2\theta$$

pa se dobija:

$$\frac{d\cos\alpha}{\sin(90-\theta)} = \frac{d\cos\alpha}{\cos\theta} = \frac{d\sin 2\theta}{\cos\theta} = n\lambda \quad \Rightarrow \quad 2d\sin\theta = n\lambda.$$

Bragov uslov pojačavanja.

Šema eksperimentalnog uređaja za ispitivanje strukture kristala Bragovom metodom prikazna je na Slici 7.2.12. Paralelni snop monohromatskog zračenja pada na pljosan kristala koja je paralelna seriji ravni sa kojih želimo da dobijemo refleksiju. Difraktovano zračenje detektuje se pomoću jonizacione komore ili fotoemulzije. I kristal i detektor nalaze se na obrtnom postolju. U eksperimentu, pri obrtanju kristala oko ose normalne na Bragovu ravan za ugao θ, detektor mora da se okrene za ugao 2θ. Pri uglovima između pravca upadnog snopa i pljosni kristala, koji zadovoljava Bragovu jednačinu, dobija se zacrnjenje na filmu, odnosno porast struje u jonizacionoj komori.

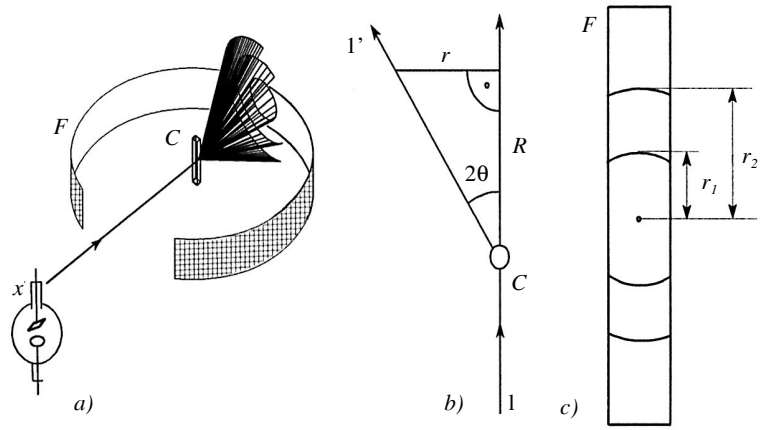


Slika 7.2.12 Šema eksperimentalnog uređaja po Bragu. Upadni snop *x*-zračenja 1 pada pod uglom θ definisanim Bragovim uslovom na kristal C a difraktovani zraci 1' se detektuju pomoću jonizacione komore JK.

7.2.3 Metod kristalnog praha (Debaj-Šererova metoda)

Iz Bragove jednačine sledi da konstruktivna interferencija zračenja reflektovanog ravnima kristalne rešetke može da se ostvari na više načina. Kristal može da se učvrsti, a da se upotrebi kontinualno rendgensko zračenje. Tada će ravni kristala da „odaberu" onu komponentu zračenja čija talasna dužina, za određeno rastojanje između ravni d i dati ugao θ između snopa i ravni, zadovoljava uslov za konstruktivnu interferenciju (Laueova metoda). U Bragovoj metodi, upotrebljava se monohromatsko x-zračenje, a obrtanjem kristala traže se uglovi koji za određenu talasnu dužinu zadovoljavaju Bragovu jednačinu.

Treću varijantu predstavlja metoda kristalnog praha ili Debaj-Šererova metoda (P. Debye, P. Scherrer). Umesto dobro razvijenih monokristala koristi se kristalni prah. U kristalnom prahu kristalići su haotično usmereni, pa za svaku seriju ravni mogu da se nađu kristalići koji su u odnosu na upadni snop usmereni tako da zadovoljavaju Bragov uslov pri određenoj talasnoj dužni λ. Prema tome, uzorak fino sprašenog kristala stavlja se na put uskog snopa monohromatskog x-zračenja. Za detekciju difraktovanog zračenja koristi se film, cilindrično omotan oko uzorka, Slika 7.2.13. Ako je za odgovarajući tip ravni i za talasnu dužni λ, Bragov ugao θ,



Slika 7.2.13 Metoda praha: a) x-zračenje iz izvora pada na kristalni prah u ampuli C koja se nalazi u centru cilindrične komore poluprečnika R unutar koje je film F. Difraktovano zračenje predstavljeno je familijom konusa koje presecaju cilindrični film ostavljajući na emulziji zacrnjenja u vidu krivih različitog poluprečnika krivine r; b) geometrijska veza između poluprečnika komore R i poluprečnika krivine r pri određenom uglu između upadnog i difraktovanog snopa, 2θ; c) slika razvijenog filma.

tada difraktovani zrak gradi sa upadnim zrakom ugao 2θ. Kako su ravni ovog tipa (i svih drugih tipova) haotično raspoređene u prostoru, reflektovani zraci grade konus sa uglom otvora 2θ, oko pravca upadnog snopa. Ovi konusi formiraju na filmu tragove u obliku lukova (lukovi su delovi koncentričnih krugova čiji je centar trag koji na filmu daje upadni nedifraktovani zrak), od kojih svaki odgovara određenom tipu ravni odnosno redu refleksije n. Ako je R poluprečnik cilindrične komore, a r poluprečnik kruga, tada važi:

$$\frac{r}{R} = \mathrm{tg}2\theta \sim \sin 2\theta \sim 2\sin\theta.$$

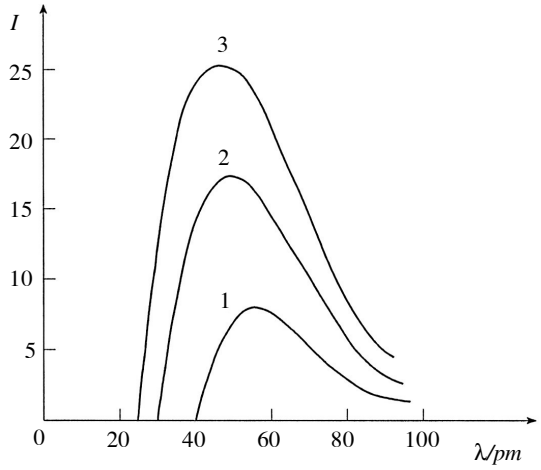
Kad se na osnovu prethodne jednakosti, u Bragovoj jednačini 2 sinθ zameni sa *r/R* dobija se:

$$d\frac{r}{R} = n\lambda.$$

Tako, na osnovu poznate strukture kristala (*d*) može da se odredi talasna dužina upotrebljenog *x*-zračenja pomoću eksperimentalno određene vrednosti *r* i poznatog poluprečnika komore *R*. Obrnuto, kad je poznata talasna dužina *x*-zračenja, može da se ispituje struktura kristala i da se odredi veličina *d*.

7.2.4 Kontinualno i karakteristično rendgensko zračenje

Pomenuli smo ranije, da *x*-zračenje nastaje u rendgenskim cevima, pri interakciji brzih elektrona sa atomima antikatode. Kad energija elektrona, kojima se bombarduje antikatoda, ne prelazi određenu vrednost, karakterističnu za materijal antikatode, nastaje *x*-zračenje koje, slično „beloj" svetlosti, ima kontinualni spektar. Ovo zračenje naziva se **zakočno rendgensko zračenje**. Zavisnost intenziteta od talasne dužine zakočnog rendgenskog zračenja predstavljena je krivama na Slici 7.2.14, za antikatodu od volframa. Na slici su prikazana tri spektra nastala pri energijama elektrona od 30, 40 i 50 KeV, redom. Krive imaju maksimum i sa strane većih talasnih dužina asimptotski se približavaju nuli. Sa strane nižih talasnih dužina, pri nekoj određenoj talasnoj dužini λ_g, krive se strmo spuštaju ka nultoj vrednosti intenziteta. Sa slike se vidi da vrednost granične (najniže) talasne dužine kontinualnog rendgenskog spektra zavisi od energije elektrona pri čemu važi:



Slika 7.2.14 Kontinualni rendgenski spektar volframa. Krive 1, 2 i 3 odgovaraju energijama elektrona od 30, 40 i 50 KeV, redom. Preseci krivih sa apscisom predstavljaju granične talasne dužine kontinualnog spektra (λ_g).

$\lambda_{1g} > \lambda_{2g} > \lambda_{3g}$ za $E_1 < E_2 < E_3$ gde je λ_{1g}, granična talasna dužina kontinualnog rendgenskog spektra kad je energija elektrona E_1, itd. Ova talasna dužina obično se zove kratkotalasna granica kontinualnog rendgenskog spektra.

Zakočno (kontinualno) *x*-zračenje nastaje u interakciji brzih elektrona s atomima mete (antikatode). Na upadne elektrone, kao na naelektrisane čestice, deluju jezgra atoma mete, menjajući im brzinu i oblik putanje, zbog čega dolazi do emisije elektromagnetnih talasa (rendgenskog zračenja). Frekvencija emitovanog zračenja zavisi od količine energije koju elektron izgubi pri takvoj interakciji. Energija E emitovana u jednoj sekundi zbog kočenja elektrona u polju jezgra atoma antikatode, prema klasičnoj (Maksvelovoj) elektromagnetnoj teoriji, može da se prikaže jednačinom (pogledati poglavlje 9.3 i jednačinu 9.3.8):

$$\frac{dE}{dt} = \frac{e^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}\left|\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}\right|^2 = \frac{e^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}\left|\frac{d\vec{\upsilon}}{dt}\right|^2 \qquad (7.2.9a)$$

pri čemu su e, naelektrisanje, $\vec{r}$, radijus vektor a $\vec{\upsilon}$ brzina elektrona. c je brzina svetlosti a ε_0, dielektrična konstanta vakuuma. Energija koja se emituje potpunim zaustavljanjem elektrona početne brzine υ_0, za vreme Δt i pri stalnom usporenju elektrona, $\vec{a}$:

$$\left(|\vec{a}| = \left|\frac{d\vec{\upsilon}}{dt}\right|\right) \text{ je:}$$

$$E = \frac{e^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}a^2\Delta t = \frac{e^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}\frac{(\upsilon_0)^2}{\Delta t}. \qquad (7.2.9b)$$

Jednačina (7.2.9b) pokazuje da je emitovana energija veća ukoliko je usporenje elektrona a veće, odnosno početna brzina υ_0 elektrona veća, a Δt manje. Elektroni s većom početnom brzinom potpuno se zaustavljaju posle dužeg intervala Δt (u odnosu na elektrone s manjom početnom brzinom). Zbog kvadratne zavisnosti energije E od početne brzine elektrona υ_0, a linearne zavisnosti od $1/\Delta t$, emitovana energija E veća je kod elektrona s većom početnom brzinom iako se oni zaustavljaju u većem intervalu vremena Δt. Razvijanjem funkcije E u Furijeov integral (videti poglavlje 8), dobija se kontinualni spektar s maksimumom energije čija se apscisa, s porastom početne energije elektrona, pomera ka kraćim talasnim dužinama u skladu s eksperimentalno dobijenim spektrima rendgenskog zračenja sa Slike 7.2.14. Pri razvijanju u Furijeov integral javljaju se, međutim, frekvencije proizvoljnih veličina, odakle proizlazi zaključak da spektar rendgenskog zračenja **ne sme** da bude ograničen ni sa jedne strane, a on to **jeste** sa strane kraćih talasnih dužina (već pomenuta kratkotalasna granica zakočnog rendgenskog zračenja). Ovo ukazuje na ograničenost primene klasične elektrodinamike na razmatranje ove pojave.

Kratkotalasna granica kontinualnog rendgenskog zračenja može da se objasni teorijom o postojanju kvanata energije ili fotona. Pri sudaru elektrona i jezgra mete menja se impuls i energija elektrona a pojavljuje se foton sa impulsom $\vec{p}$ i s frekvencijom ν odnosno sa energijom $h\nu$. Sa druge strane, jezgro atoma mete s masom M, koje je do interekcije sa elektronom mirovalo, dobija impuls $\vec{p}_n$ i energiju E_n. Za ovu interakciju napisaćemo zakon o održanju impulsa i energije:

$$\vec{p}_e = \vec{p}_e' + \vec{p}_n + \vec{p} \tag{7.2.10}$$

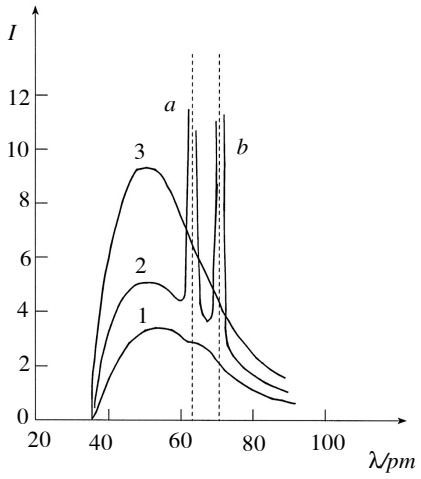
$$E_e + Mc^2 = E'_e + E_n + h\nu \tag{7.2.11}$$

gde su $\vec{p}_e$ i $\vec{p}'_e$ impulsi elektrona pre i posle sudara; E_e i E'_e su početna energija elektrona i energija elektrona posle sudara. Na osnovu detaljne analize ovako postavljenih jednačina sledi, da se foton može emitovati u bilo kom pravcu i sa energijom između nule i neke najveće vrednosti. Najveća vrednost energije emitovanih fotona jednaka je kinetičkoj energiji T ($T = E_e - m_0c^2$) elektrona; m_0 je masa mirovanja elektrona. Prema tome:

$$T = \frac{m\upsilon^2}{2} = eU = h\nu = h\frac{c}{\lambda_g}. \tag{7.2.12}$$

Iz jednačine (7.2.12), u kojoj je $h\nu$ energija emitovanog fotona (h je Plankova konstanta, e naelektrisanje elektrona, a c brzina svetlosti), T kinetička energija koju su elektroni stekli ubrzavanjem u električnom polju, pri čemu je napon između elektroda iznosio U, određuje se kratkotalasna granica kontinualnog rendgenskog spektra λ_g. Ovako izračunata vrednost kratkotalasne granice slaže se sa onom koja se dobija iz eksperimenta.

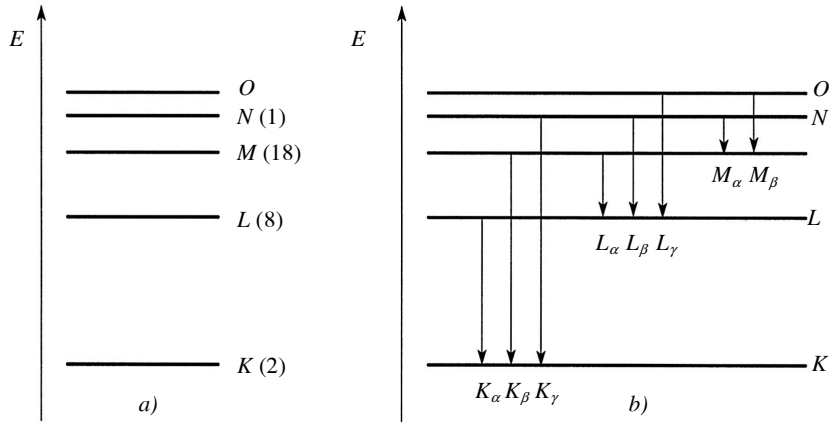
Na Slici 7.2.15 prikazana je kriva zavisnosti intenziteta rendgenskog zračenja od talasne dužine, za molibden, pri energiji elektrona od 35 k*e*V. Na krivoj koja ima kontinualan oblik zapažaju se dva oštra maksimuma, pri strogo definisanim talasnim dužinama λ_1 i λ_2. Oni odgovaraju spektralnim linijama karakterističnog rendgenskog zračenja.



Slika 7.2.15 Rendgenski spektri iridijuma (1), molibdena (2) i volframa (3) pri energiji upadnih elektrona od 35 k*e*V. Na kontinualni spektar molibdena superponirana su dva oštra maksimuma na talasnim dužinama λ_1 i λ_2 što odgovara spektralnim linijama karakterističnog rendgenskog zračenja. Energija upadnih elektrona nije bila dovoljna za pobuđivanje rendgenskog karakterističnog spektra iridijuma i volframa.

Karakteristično rendgensko zračenje je drugi vid *x*-zračenja i ima diskretni ili linijski spektar, koji je tipičan (karakterističan) za određeni atom odnosno hemijski element. Takav spektar odslikava strukturu unutrašnjih energijskih nivoa atoma kao što optički spektar odražava energijski raspored spoljašnih nivoa atoma. Mehanizam

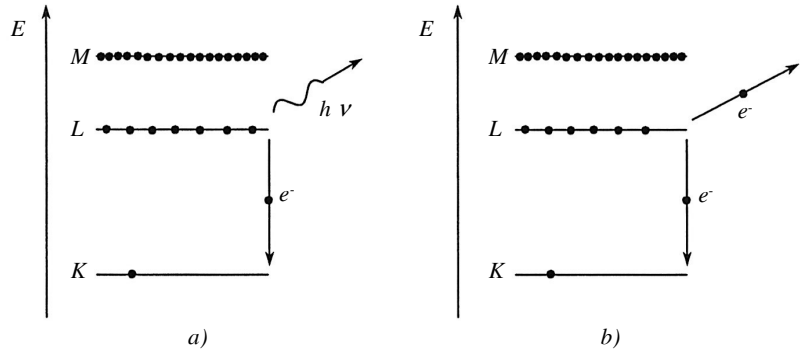
emisije zračenja iz atoma uvek je isti bilo da je reč o karakterističnom rendgenskom zračenju (energija fotona reda veličine K*e*V-a) ili o zračenju mnogo manje energije (red veličine *e*V-a), jer prema Borovom tumačenju atom emituje energiju pri prelazu elektrona iz višeg u niže kvantno stanje. Kad se prelazi vrše između kvantnih stanja spoljašnjih elektrona (čija je energija veze reda veličine nekoliko *e*V) nastaje optički spektar. S druge strane, karakteristično *x*-zračenje javlja se pri prelazu elektrona sa viših energijskih nivoa na *K, L* ili *M* nivo, dakle, na nivoe koji imaju najveću energiju veze elektrona. Ovi unutrašnji nivoi atoma su, za razliku od spoljašnjih, potpuno ispunjeni elektronima: nivo *K* ($n = 1$) sa dva elektrona; nivo *L* ($n = 2$) sa osam elektrona; nivo *M* ($n = 3$) sa 18 elektrona, itd., pa se pod normalnim uslovima prelazi na ove nivoe i ne događaju (sa *n* se označava glavni kvantni broj). Na Slici 7.2.16a kao primer data je šema energijskih nivoa bakra (Cu), koji u atomskom omotaču ima 29 elektrona. Prelaz elektrona na *K, L* ili *M* nivo postaje moguć ako se u ovim nivoima uprazni bar jedno elektronsko mesto. To se postiže bombardovanjem atoma elektronima (ili fotonima) velike energije, koji imaju energiju koja je jednaka ili je veća od energije veze elektrona *K, L* ili *M* nivoa odgovarajućeg atoma.



Slika 7.2.16 Šema energijskih nivoa atoma bakra; a) nivoi energije; b) spektar rendgenskog karakterističnog zračenja.

Vrednost ove energije možemo da izračunamo korišćenjem Borove jednačine za energiju elektrona u nivou određenim kvantnim brojem *n*. Na primer, za bakar (Z=29), na osnovu jednačine: $E = -hcR\,(Z\text{-}1)^2$, za elektron u *K*-nivou ($n = 1$) dobija se vrednost od 10670 *eV*. U prethodnoj jednačini, *h* je Plankova konstanta, *c* brzina svetlosti a *R* Ridbergova konstanta, dok je konstata zaklanjanja 1. Ovi brzi elektroni (odnosno fotoni) pobuđuju ili jonizuju atom, stvarajući pri tome prazninu u nekom od unutrašnjih nivoa atoma (*K, L*,...). Nastala praznina, na primer u *K*-nivou, posle vrlo kratkog vremena (10^{-8}s), popunjava se elektronom koji prelazi sa energijski višeg nivoa, što je praćeno emisijom *x*-kvanata energije *hv* koja odgovara razlici energija nivoa između kojih se dogodio prelaz. Dakle, rendgenski karakteristični spektri nastaju prelazom elektrona na *K*-nivo (sa *L, M, N*, ...); na *L*-nivo (sa nivoa *M, N*); na *M*-nivo (sa nivoa *N*, ...). Spektralne linije koje nastaju prelazom elektrona na *K*-nivo označavaju se kao K_α, K_β, K_γ u zavisnosti od toga da li elektron prelazi sa *L*

(K_α), sa M (K_β) ili N (K_γ) nivoa. Spektralne linije koje prate prelaz na L-nivo označavaju se kao L_α, L_β, L_γ zavisno od toga da li se prelaz vrši sa M, N nivoa. Pri prelazu na M nivo, nastaje zračenje čije spektralne linije označavamo sa M_α, M_β, Slika 7.2.16b. Napomenimo da svaki prelaz elektrona na upražnjeno mesto u nižem nivou, stvara novo prazno mesto, što za posledicu ima sukcesivne prelaze elektrona sa viših nivoa na donja upražnjena mesta, uz emisiju x-fotona odgovarajuće energije. Rendgenski spektri svih elemenata sastoje se od malog broja linija, koje su na sličan način raspoređene a imaju jednu istu finu strukturu.

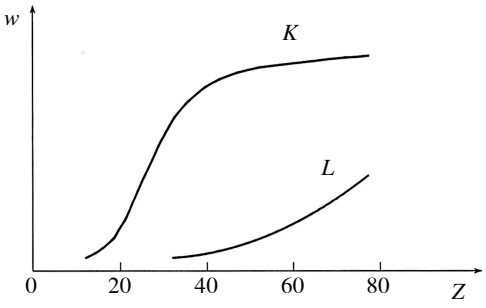


Slika 7.2.17 Tipovi prelaza: a) radijacioni; b) Ožeov.

Emisija x-zračenja ima i alternativni proces, a to je emisija Ožeovih elektrona. Pojava je nazvana u čast naučnika Pjera Ožea (Pierre Victor Auger), koji ju je otkrio 1937. godine. Naime, šupljina nastala u K, L, nivou (zbog čega je atom u pobuđenom stanju) popunjava se elektronom sa višeg nivoa ali elektronski prelaz *ne* prati emisija x-kvanta sa energijom koja bi odgovarala razlici energija nivoa između kojih se prelaz dogodio. Na primer, kod prelaza elektrona sa L na K-nivo, ova razlika energije iznosi $E_K - E_L$ gde su E_K i E_L energija nivoa K i L i njen ekvivalent se, kod Ožeovog efekta, troši za izbijanje elektrona iz nekog od viših energijskih nivoa, npr. M nivoa. U tom slučaju, elektron sa M nivoa biva udaljen iz atoma (atom se jonizuje) s kinetičkom energijom T, koja je jednaka $T = (E_K - E_L) - E_{jM}$, gde je E_{jM} energija veze elektrona u M-nivou (ili energija koja je potrebna da se elektron sa M-nivoa udalji iz atoma). Ožeov proces dovodi do nastanka dve ili više novih šupljina u energijskim nivoima elektrona. Na Slici 7.2.17 šematski su predstavljeni radijacioni (emisija fotona) i Ožeovi (neradijacioni) procesi. Kad se uzmu u obzir oba procesa, radijacioni i Ožeov, jasno je da intenzitet emitovanog x-zračenja zavisi od verovatnoće Ožeovog procesa.

Fluorescentni prinos w definiše se kao odnos broja emitovanih fotona rendgenskog zračenja u datoj spektralnoj seriji prema ukupnom broju nastalih praznina, N po jedinici vremena:

$$w = \frac{(nK_{\alpha 1} + nK_{\alpha 2} + nK_{\beta 1} + nK_{\beta 2} + \ldots)}{N}$$

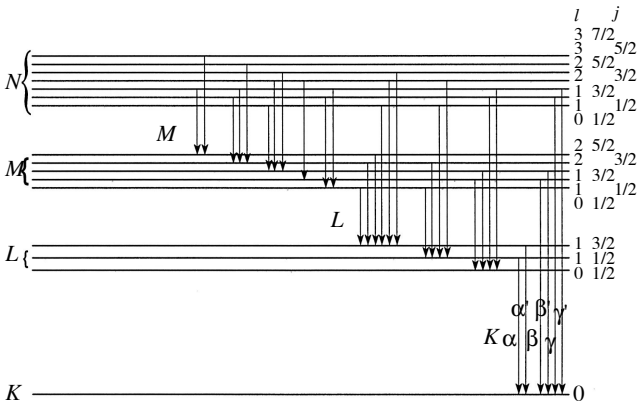


Slika 7.2.18 Fluorescentni prinos *w* za *K* i *L* rendgensku seriju u zavisnosti od rednog broja *Z*.

gde je $nK_{\alpha 1}$, itd. broj *x*-fotona odgovarajuće frekvencije. Očigledno je to da je Ožeov prinos jednak (1-*w*). Za datu spektralnu seriju *w* raste s rednim brojem elementa *Z*. Ožeov prinos naročito je veliki kod lakih atoma, Slika 7.2.18.

7.2.5 Fina struktura rendgenskih spektralnih linija

Rendgenski spektri po svojoj prirodi su jednoelektronski spektri. Šema energijskih nivoa (termova) atoma s jednom prazninom, u inače popunjenoj elektronskoj ljusci, slična je onoj kod alkalnih atoma. Hajzenberg je još 1931. godine pokazao da je energijsko stanje atoma s jednom prazninom u odnosu na potpuno popunjeni energijski nivo ekvivalentno stanju atoma s jednim elektronom u određenom nivou. Kao i kod alkalnih atoma, svaki energijski nivo sastoji se od (2*n*-1) više ili manje bliskih podnivoa (*n* je glavni kvantni broj), Slika 7.2.19.

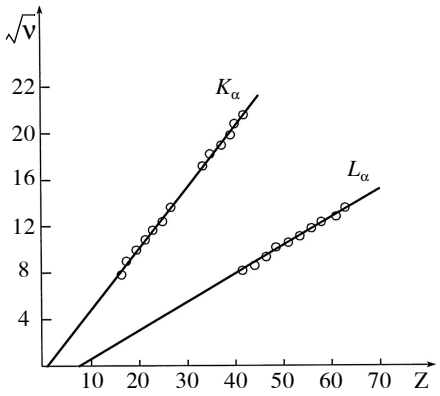


Slika 7.2.19 Fina struktura rendgenskih spektralnih linija.

Na levoj strani slike označeni su nivoi energije *K, L, M* (kojima odgovaraju vrednosti glavnog kvantnog broja *n* = 1,2,3,... redom), a desno je uz svaki podnivo napisana vrednost kvantnih brojeva *l* i *j*. Za prelaze važe pravila izbora: $\Delta l = +1$ ili -1, a za $\Delta j = 0$, -1 ili +1. Sa slike se vidi da su K_α, K_β, i K_γ dubleti. Dakle, možemo da zaključimo da linije K_α, K_β, L_α, L_β, itd. imaju finu strukturu odnosno da se svaka od njih sastoji od nekoliko vrlo bliskih linija različitog intenziteta.

7.2.6 Mozlijev zakon

Rendgenski spektri svih elemenata imaju relativno mali broj spektralnih linija, koje su na sličan način raspoređene jedna u odnosu na drugu, a imaju istu finu strukturu. Pri povećanju rednog broja Z elementa, rendgenski spektar pomera se u kratkotalasnu oblast, ne menjajući svoju strukturu. Ova zakonitost izražena je zakonom Mozlija (H. G. J. Moseley, 1885--1915), prema kome je kvadratni koren frekvencije emitovanog rendgenskog zračenja određene serije, linearna funkcija rednog broja Z elementa, Slika 7.2.20. Mozlijevi eksperimenti u vreme kada su izvedeni imali su ogroman značaj za određivanje naelektrisanja jezgra atoma. Oni su i pokazali da su osobine atoma (a takva osobina je i frekvencija emitovanog x-zračenja) funkcija rednog (atomskog) broja elementa.



Slika 7.2.20 Mozlijev zakon.

Na osnovu Borovog modela atoma ova empirijski otkrivena zakonitost (1913. godine) može da se prikaže jednačinom:

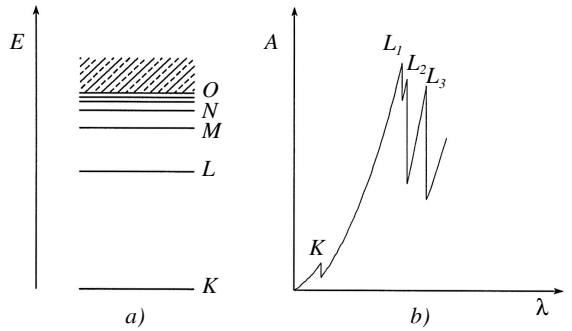
$$\nu = Rc(Z-a)^2\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{k^2}\right).$$

U prethodnoj jednačini R je Ridbergova konstanta, c brzina svetlosti, n i k su prirodni brojevi ($n < k$), dok je a konstanta zaklanjanja (vodi računa o uticaju drugih elektrona na efektivno naelektrisanje kojim jezgro deluje na elektron koji vrši prelaz). Za K seriju $a = 1$, za L seriju $a = 7{,}5$.

7.2.7 Rendgenski apsorpcioni spektri

Ako snop polihromatskog x-zračenja propustimo kroz neki materijal, nastaje rendgenski apsorpcioni spektar. Ovaj spektar nema linijsku strukturu, a nema ni oštre linije određene talasne dužine kao kod optičkog spektra u apsorpciji. On se sastoji iz traka s oštrim ivicima sa strana većih talasnih dužina. Kontinualnost rendgenskog apsorpcionog spektra ukazuje na to da jedno od dve energije stanja između kojih se događa apsorpcija nije kvantovano. Objasnimo ovo bolje. Apsorbujući energiju, elektron (npr. iz K-nivoa) može da pređe u neki od nezaposednutih optičkih nivoa ili u oblast iznad granice serije (granice jonizacije), Slika 7.2.21a. Ako se zna da su energijske razlike između optičkih nivoa zanemarljivo male u odnosu na energijski razmak između nivoa odgovornih za rendgenske spektre (red veličine *eV* i *MeV*), zaključujemo da se apsorbuje energija koja je jednaka granici serije ili je za neki (bilo koji) iznos veća od nje. Ovo i uslovljava izgled apsorpcionog spektra koji je prikazan na Slici 7.2.21b. Oštra ivica sa strane većih talasnih dužina odgovara ap-

sorpciji granice *K* serije (apsorpciji energije koja je jednaka energiji jonizacije iz *K*-nivoa), a kontinualni spektar s leve strane ivice pokazuje da su elektroni prešli iz vezanog (kvantovanog) u slobodno (nekvantovano) stanje. Kod apsorpcije iz *L*-nivoa, javljaju se, sa strane većih talasnih dužina, tri oštre ivice koje odgovaraju trima talasnim dužinama (ili energijama). Ovo stoga što se *L* ($n = 2$) nivo sastoji iz tri podnivoa, pa, praktično, postoje tri (ali dosta bliske) vrednosti energije za granicu *L* serije. Napomenimo da postojanje kontinuuma energije u apsorpciji ukazuje na to da je nastalo upražnjeno mesto u nekom od unutrašnjih slojeva atoma.



Slika 7.2.21 Poreklo apsorpcionog spektra: a) šema energijskih nivoa; b) rendgenski apsorpcioni spektar. Oštre ivice sa definisanom talasnom dužinom odgovaraju vrednosti talasne dužine (energije) granice serije. Kod *L* serije granica je trostruka (jer se *L*-nivo sastoji od tri podnivoa), a u slučaju *M* serije granica je petostruka jer se *M*-nivo sastoji od pet podnivoa.

Primeri

Primer 7.2.1 Odrediti energije *K, L* i *M*-nivoa atoma (a zatim ih predstaviti šematski) ako je $\lambda_{K\alpha} = 2{,}75$ Å, $\lambda_{K\beta} = 2{,}54$ Å, a talasna dužina koja odgovara granici *K*-serije iznosi $\lambda_K = 2{,}49$ Å. Kolika je talasna dužina L_α linije? O kojem elementu je reč?

REŠENJE:

Izračunaćemo prvo energije koje odgovaraju K_α, K_β kvantima, odnosno kvantu granice *K* serije:

$$E_{K_\alpha} = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6,626\times10^{-34}\,\mathrm{Js})(2,998\times10^{8}\,\mathrm{m/s})}{(2,75\times10^{-10}\,m)(1,602\times10^{-19}\,J)} = 4,515\ \mathrm{k}eV,$$

Na sličan način dobija se za:
$E_{K\beta} = 4{,}940$ k*e*V; $E_K = 4{,}980$ k*e*V,
Energija *K*-nivoa je $E_K = -4{,}980$ k*e*V,
$E_L - E_K = E_{k\alpha} = 4{,}515$ k*e*V; $E_L = -4{,}980 + 4{,}515 = -0{,}465$ k*e*V,
$E_M - E_K = E_{k\beta} = 4{,}940$ k*e*V; $E_M = -4{,}980 + 4{,}940 = -0{,}040$ k*e*V.
Izračunajmo sada talasnu dužinu L_α, linije:
$E_{L\alpha} = E_M - E_L = -0{,}040 + 0{,}465 = 0{,}425$ k*e*V; $\lambda_{L\alpha} = hc/E = 29$ Å.
Primenjujući izraz: $v = R\,(Z - 1)^2\,(1/1^2 - 1/2^2)$ odredićemo o kojem elementu je reč:

$$(Z-1)^2 = \frac{1}{(2,75\times10^{-10}\,\mathrm{m})\times0,75\times(1,097\times10^{7}\,\mathrm{m^{-1}})} \Rightarrow Z = 22 \quad \text{(Ti)}$$

Primer 7.2.2 Pri ozračivanju atoma kriptona monohromatskim rendgenskim zračenjem talasne dužine λ, zapaženo je da u nekim slučajevima izleću iz atoma dva elektrona: fotoelektron oslobođen iz *K*-nivoa i elektron oslobođen Ožeovim efektom iz *L*-nivoa. Energija veze *K* i *L* elektrona su 14,4 i 3,0 keV, redom. Odrediti kinetičku energiju oba elektrona ako je talasna dužina upotrebljenog rendgenskog zračenja 0,65 Å.

REŠENJE:

Odredimo najpre energiju kvanta *x*-zračenja:

$$E_\lambda = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6,626\times10^{-34}\text{Js})\times(2,998\times10^{8}\text{m/s})}{(0,65\times10^{-10}\text{ m})\times(1,602\times10^{-19}\text{J})} = 19,1\text{ k}e\text{V}$$

pa je kinetička energija elektrona izbijenog sa *K*-nivoa:
$T_k = E_\lambda - E_K = 19{,}1$ keV $- 14{,}4$ k*e*V $= 4{,}7$ k*e*V a kinetička energija Ožeovog elektrona je:
$T_{Ože} = (E_K - E_L) - E_L = (14{,}4 - 2{,}0) - 2{,}0 = 10{,}4$ *ke*V.

7.3 KOMPTONOV EFEKT

DODATAK 7.3

D-7.3.1 Relativističke jednačine

Masa čestice koja se kreće brzinom υ je:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{\upsilon^2}{c^2}}} \qquad \text{(D-7.3.1)}$$

gde je m_0 masa mirovanja čestice, a c brzina svetlosti u vakuumu. Mehanički impuls $\vec{p}$ (količina kretanja) je:

$$\vec{p} = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{\upsilon^2}{c^2}}}\vec{\upsilon}\,. \qquad \text{(D-7.3.2)}$$

Ukupna energija slobodne čestice koja se kreće brzinom υ je:

$$E = mc^2 = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\frac{\upsilon^2}{c^2}}}\,. \qquad \text{(D-7.3.3)}$$

Iz (D-7.3.2) i (D-7.3.3) sledi:

$$\vec{p} = \frac{E}{c^2}\vec{\upsilon}\,. \qquad \text{(D-7.3.4)}$$

Iz (D-7.3.4) sledi:

$$\frac{1}{c}\vec{v} = \frac{c}{E}\vec{p}$$

što smenom u (D-7.3.3) daje:

$$E\sqrt{1-\frac{p^2c^2}{E^2}} = m_0c^2$$

odakle se dizanjem na kvadrat cele jednačine dobija:

$$E^2\left(1-\frac{p^2c^2}{E^2}\right) = (m_0c^2)^2$$

a rešavanjem po E dobija se veza između ukupne energije relativističke čestice i njenog impulsa:

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}. \qquad \text{(D-7.3.5)}$$

Za slobodnu relativističku česticu (potencijalna energija je jednaka nuli), ukupna energija E predstavlja zbir kinetičke energije T i energije mase mirovanja:

$$E = T + m_0c^2$$

odakle se zamenjivanjem u (D-7.3.5) dobija veza između impulsa i kinetičke energije čestice:

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{T^2 + 2Tm_0c^2}. \qquad \text{(D-7.3.6)}$$

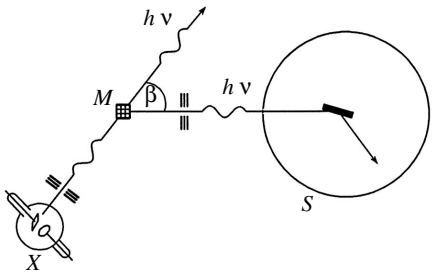
Za čestice čija je masa mirovanja jednaka nuli (foton, neutrino), iz (D-7.3.5) i (D-7.3.6) dobija se jednostavan odnos između energije i impulsa:

$$E = T = pc \quad \Rightarrow$$

$$p = \frac{E}{c} = \frac{T}{c} = \frac{h\nu}{c}. \qquad \text{(D-7.3.7)}$$

Kad se čvrsto telo izloži dejstvu monohromatskog rendgenskog ili γ-zračenja dolazi do rasejavanja zaračenja. U spektru rasejanog zračenja zapaža se, pod određenim eksperimentalnim uslovima, pored zračenja talasne dužine λ, koja odgovara talasnoj dužini upadnog snopa i zračenje nešto veće talasne dužine, λ'. Pomoću zakona klasične fizike nije se moglo objasniti zašto se u rasejanom snopu javlja i zračenje veće talasne dužine od talasne dužine upadnih talasa.

Kompton (Artur Holly Compton, 1892–1962, Nobelova nagrada za fiziku 1927), izveo je niz eksperimenata tokom 1922/23. godine ispitujući (Bragovim) spektrometrom sastav rasejanog rendgenskog zračenja. Na Slici 7.3.1 prikazana je šema Komptonovog ogleda. Monohromatsko *x*-zračenje sa antikatode, posle prolaska kroz dijafragmu, pada na neko čvrsto telo sa kojeg se rasejava. Rendgenska cev može da se pomera, čime se menja ugao β između pravca upadnog snopa i pravca rasutog zračenja, koje dolazi do kristala rendgenskog spektrometra, pomoću kojeg se određuju njegova talasna dužina i intenzitet.

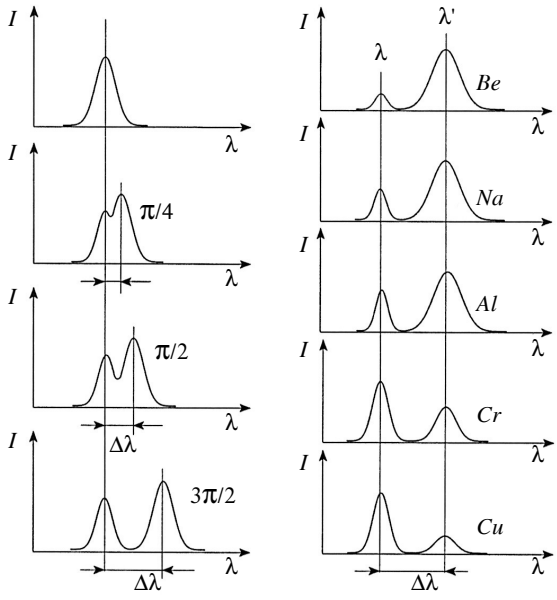


Slika 7.3.1 Šema Komptonovog eksperimenta. *X*-zračenje, rasejano sa čvrstog tela pod uglom β u odnosu na upadni snop, pada na kristal spektrometra S pomoću koga mu se određuju talasna dužina i intenzitet.

Spektri zračenja rasutog sa grafita, pri različitim uglovima β, prikazani su na Slici 7.3.2 (levo). Spektar prikazan na slici (osim kada je ugao $\beta = 0$, sadrži dva maksimuma i ukazuje na postojanje komponente zračenja s talasnom dužinom λ, koja odgovara talasnoj dužini upadnog zračenja, i komponente zračenja s promenjenom talasnom dužinom λ'. Razlika ovih dveju talasnih dužina ($\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$) raste s porastom ugla rasejavanja β. Na Slici 7.3.2 (desno) prikazani su spektri *x*-zračenja rasuti različitim elementima ali u istom pravcu β. Kod berilijuma koji je najlakši (A=9) intenzitet komponente zračenja s promenjenom talasnom dužinom veći je od intenziteta komponente čija je talasna dužina ostala ista. S porastom atomske mase intenzitet komponente s promenjenom talasnom dužinom opada i u rasejanom zračenju preovladava komponenta čija se talasna dužina ne menja. Treba uočiti to da veličina promene talasne dužine ($\Delta\lambda$) ne zavisi od prirode supstancije, već samo od ugla rasejavanja β.

Kako je već rečeno, Komptonovi eksperimenti nisu mogli da se objasne zakonima klasične elektrodinamike prema kojima se zračenje uzima kao talasna pojava. Teorijsko objašnjenje efekta predložio je sam Kompton polazeći od pretpostavke da zračenje ima čestičnu prirodu, odnosno da se sastoji od diskretnih kvanata – fotona. Foton je čestica koja ima masu mirovanja jednaku nuli, određenu energiju *hv* ali i **impuls** *hv*/*c* [jednačina (D-7.3.7)], gde je *h* Plankova konstanta, *v* frekvencija, a *c* brzina svetlosti.

Efekt sada lako može da se kvalitativno objasni. Foton se elastično sudara sa slabo vezanim elektronom (uslov da je elektron slabo vezan, u stvari, znači da je energija veze elektrona u atomu zanemarljivo mala u odnosu na energiju koju elektron primi sudarom i da može da se potpuno zanemari u razmatranju pojave). Pri sudaru elektron preuzima deo energije fotona pa je njegova energija posle rasejavanja manja od energije pre rasejavanja. Pošto je talasna dužina obrnuto proporcionalna energiji ($E=hc/\lambda$), rasejani foton ima veću talasnu dužinu od talasne dužine upadnog fotona. Pri tome, elektron napušta atom brzinom koja zavisi od iznosa primljene energije. Najveća energija koju elektron primi od fotona može da ga dovede do kretanja brzinom koja je bliska brzini svetlosti, pa za kvantitativno tumačenje pojave treba da se uzmu u obzir relativistički efekti i da se koriste odgovarajuće jednačine relativističke mehanike.

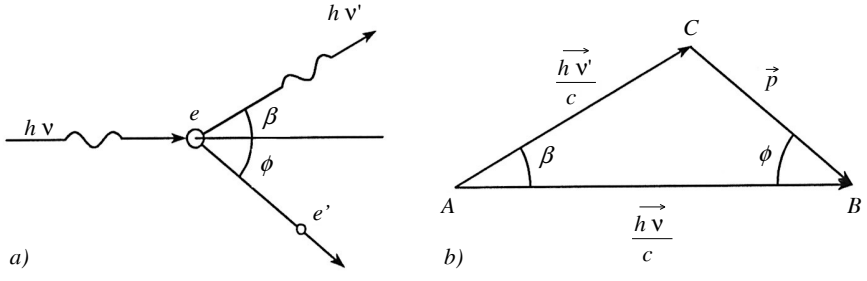


Slika 7.3.2 Prikaz Komptonovog efekta (levo): spektar *x*-zračenja rasutog na grafitu, pri raznim uglovima β; (desno): spektar *x*-zračenja rasutog na raznim metalima pri stalnom β.

Za kvantitativni opis pojave služimo se jednostavnom slikom. Foton sa energijom $h\nu$ i impulsom $\vec{p}_\nu = \vec{h}\nu/c$ sudara se sa elektronom koji miruje, Slika 7.3.3a. Posle sudara foton nastavlja da se kreće sa impulsom $\vec{p}_\nu$ pod uglom β u odnosu na prvobitni pravac kretanja, a elektron odlazi sa impulsom $\vec{p}$ pod uglom ϕ. Kako je u pitanju elastični sudar, važe zakoni o održanju energije i impulsa. To znači da zbir energija (i impulsa) slobodnog fotona i elektrona pre interakcije mora da bude jednak zbiru energija (i impulsa) fotona i elektrona posle rasejavanja. Naš cilj je da na osnovu ovih zakona i drugih opštih jednačina (veze između impulsa i energije) nađemo izraz koji povezuje eksperimentalnim putem merljive veličine. To su talasna dužina rasejanog *x*-zračenja λ i ugao rasejanja β. Pošto u zakone održanja ulaze impuls i energija elektrona koje neposredno ne merimo, oni treba da se pogodnim računskim transformacijama uklone.

Napišimo sada zakon o održanju energije:

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + mc^2 \tag{7.3.1}$$



Slika 7.3.3 Elastični sudar fotona i elektrona: a) šematski prikaz; b) vektorski dijagram.

$h\nu$ je energija fotona pre sudara, a m_0c^2 energija koja može da se pripiše elektronu u stanju mirovanja (m_0 je masa mirovanja elektrona). Posle interakcije foton odlazi u

pravcu β sa energijom $h\nu'$ dok elektron odlazi sa energijom mc^2. U jednačini (7.3.1) energiju elektrona zamenjujemo ekvivalentnim izrazom (koji je funkcija impulsa elektrona), a na osnovu jednačine (D-7.3.5):

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + \sqrt{p^2c^2 + m_0{}^2c^4}. \tag{7.3.2}$$

Zakon o održanju impulsa napisaćemo u vektorskom obliku:

$$\vec{p}_\nu = \vec{p}_{\nu'} + \vec{p} \tag{7.3.3}$$

pri čemu intenzitet impulsa fotona pre i posle rasejavanja iznosi $h\nu/c$ i $h\nu'/c$, redom. Neka nam vektori impulsa fotona i elektrona predstavljaju stranice trougla ABC na Slici 7.3.3b. Ako na ovaj trougao odnosno vektorski dijagram primenimo kosinusnu teoremu dobijamo:

$$(\frac{h\nu}{c})^2 + (\frac{h\nu'}{c})^2 - 2\frac{h\nu h\nu'}{c^2}\cos\beta = p^2$$

što posle sređivanja daje:

$$(h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2h^2\nu\nu'\cos\beta = p^2c^2. \tag{7.3.3'}$$

U jednačini (7.3.2) prebacujemo $h\nu'$ na levu stranu i tako transformisani izraz dižemo na kvadrat:

(7.3.2') $$h^2\nu^2 + h^2\nu'^2 + 2m_0c^2h\nu - 2h\nu h\nu' - 2m_0c^2h\nu' = p^2c^2.$$

Oduzmimo jednačinu (7.3.3') od jednačine (7.3.2'):

$$m_0c^2(\nu - \nu') - h\nu\nu'(1 - \cos\beta) = 0.$$

Podelimo gornju jednačinu sa $\nu\nu'$ pa dobijamo izraz:

$$\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = 2\frac{h}{m_0c^2}\sin^2\frac{\beta}{2}. \tag{7.3.4}$$

Kako je $\nu = c/\lambda$ (λ je talasna dužina) iz (7.3.4) dobija se:

$$\lambda' - \lambda = 2\frac{h}{m_0c}\sin^2\frac{\beta}{2}. \tag{7.3.5}$$

Veličina $\lambda_C = h/m_0c$ zove se Komptonova talasna dužina i predstavlja kombinaciju tri univerzalne konstante: Plankove konstante h, mase mirovanja elektrona m_0 i brzine svetlosti u vakuumu c. Komptonova talasna dužina λ_C iznosi 0,0242 $\mathring{A}$.

Na osnovu jednačine (7.3.5) sledi da promena talasne dužine rasejanog zračenja u odnosu na talasnu dužinu upadnog zračenja zavisi samo od ugla β ali ne i od talasne dužine upadnog zračenja λ. Za $\beta = 0$ nema promene talasne dužine dok

je za $\beta = \pi/2$ razlika u talasnoj dužini tačno jednaka Komptonovoj talasnoj dužini λ_C. Najzad, najveća promena talasne dužine dobija se za ugao $\beta = \pi$, kad se foton odbija nazad s talasnom dužinom $\lambda' = 2\lambda_C = 0,048\ \mathring{A}$. Kako promena talasne dužine ne zavisi od talasne dužine upadnog zračenja λ, sledi da je relativna promena talasne dužine veoma različita za upadno *x*-zračenje različitih talasnih dužina. Tako za *x*-zračenje s talasnom dužinom od 100 $\mathring{A}$, promena talasne dužine iznosi najviše 4% od upadne talasne dužine λ. Kod *x*-zračenja srednje tvrdoće ($\lambda = 0,5\mathring{A}$) promena talasne dužine je oko 10% od upadne talasne dužine, a za γ-zračenje, promena talasne dužine je reda veličine same λ.

Teorijski izvedena jednačina (7.3.5) **tačno** tumači rezultate dobijene eksperimentom. Proračunajmo sada vrednosti kinetičke energije s kojom odlazi elektron posle Komptonovog rasejanja. Kinetička energija T elektrona biće jednaka razlici energija fotona pre i posle interakcije:

$$T = h\nu - h\nu' = h\Delta\nu \Rightarrow \frac{T}{h\nu} = \frac{\Delta\nu}{\nu}. \tag{7.3.6}$$

Iz jednačine (7.3.4) dobija se:

$$\frac{\nu - \nu'}{\nu\nu'} = 2\frac{h}{m_0c^2}\sin^2\frac{\beta}{2} \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{T}{h\nu} = 2\frac{h\nu'}{m_0c^2}\sin^2\frac{\beta}{2} = \frac{2\lambda_C\sin^2\frac{\beta}{2}}{\lambda + 2\lambda_C\sin^2\frac{\beta}{2}} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda + \Delta\lambda}. \tag{7.3.7}$$

Primer Neka upadno *x*-zračenje ima talasnu dužinu od $\lambda = 0,242\ \mathring{A}$. Kad je ugao rasejanja $\beta = \pi/2$:

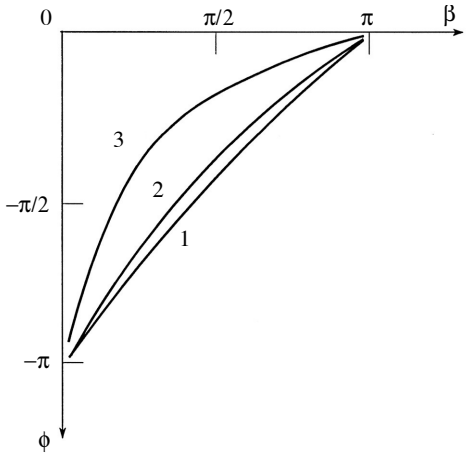
$$\frac{T}{h\nu} = \frac{2 \times 0,0242 \times 0,5}{0,242 + 0,0242} = \frac{1}{11}$$

što znači da elektron preuzima relativno mali deo energije (1/11) upadnog fotona. Izračunajmo sada $T/h\nu$ kad je talasna dužina upadnog *x*-zračenja 0,0242 $\mathring{A}$ pri istom uglu rasejanja:

$$\frac{T}{h\nu} = \frac{0,0242}{0,0242 + 0,0242} = \frac{1}{2}.$$

U ovom slučaju elektron dobija veći deo energije (1/2) fotona.

Odredimo sada pravac emitovanih elektrona. Sa Slike 7.3.3 sledi:



Slika 7.3.4 Povezanost uglova β i ϕ izračunata na osnovu 7.3.10. Kriva 1 odnosi se na upadno zračenje talasne dužine $\lambda = 0,01\ \mathring{A}$, kriva 2 je izračunata za $\lambda = 0,05\ \mathring{A}$, a kriva 3 za $\lambda = 0,1\ \mathring{A}$.

$$tg\phi = \frac{-\frac{hv'}{c}\sin\beta}{\frac{hv}{c} - \frac{hv'}{c}\cos\beta} = \frac{-\sin\beta}{\frac{v}{v'} - \cos\beta}. \tag{7.3.8}$$

Vratimo se na jednačinu (7.3.4) koju ćemo napisati u obliku:

$$\frac{v}{v'} - 1 = 2\frac{hv}{m_0c^2}\sin^2\frac{\beta}{2}. \tag{7.3.9}$$

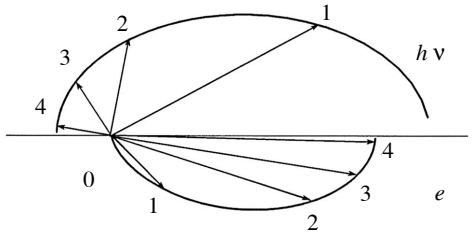
Zamenimo v/v' iz jednačine (7.3.9) u (7.3.8):

$$\mathrm{tg}\phi = -\frac{\sin\beta}{2\frac{hv}{m_0c^2}\sin^2\frac{\beta}{2} - \cos\beta + 1} = -\frac{\mathrm{ctg}\frac{\beta}{2}}{1 + \frac{\lambda_C}{\lambda}}. \tag{7.3.10}$$

Na Slici 7.3.4 predstavljena je zavisnost ugla pod kojim odlazi elektron od ugla pod kojim se rasejava foton, kao grafički prikaz jednačine (7.3.10) za tri različite vrednosti talasne dužine λ.

Na Slici 7.3.5 su u obliku polarnog dijagrama prikazani pravci (i energije) rasejanog fotona i elektrona u Komptonovom efektu.

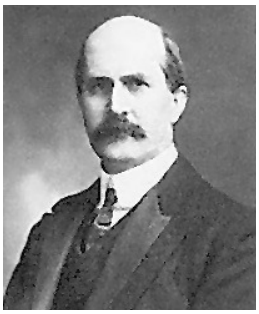
Slika 7.3.5 Polarni dijagram prikazuje pravce (i energije) rasejanog fotona i elektrona u Komptonovom efektu. Dijagram je nacrtan za talasnu dužinu upadnog zračenja $\lambda = 0{,}01\ \mathring{A}$. Pravac strelice označava pravac u kojem se rasejava foton odnosno elektron, dok je njena dužina srazmerna delu energije koju sa sobom nosi rasejani foton odnosno elektron. Odgovarajući par vektora označen je istim brojem. Grafik može da se nacrta na osnovu jednačine 7.3.7.



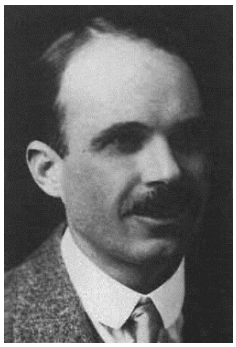
Još treba da rastumačimo zašto je kod težih atoma intenzitet linije s nepromenjenom talasnom dužinom znatno veći od one s promenjenom talasnom dužinom. Kod težih atoma velika je verovatnoća za sudar fotona i unutrašnjih, čvrsto vezanih elektrona. Tada iznete pretpostavke za elastično rasejavanje više ne važe i mora da se pretpostavi da u tom slučaju foton izmenjuje impuls i energiju s atamom u celini, pa se zbog velike mase atoma energija fotona praktično ne menja.

Vilhelm Konrad Rendgen (Wilhelm Konrad Röntgen, 1845–1923). Studirao je na Mašinskom fakultetu u Cirihu a bavio se eksperimentalnom fizikom kao asistent Avgusta Kunta (August Kundt, po njemu Kuntova cev). Po završetku studija postaje profesor na univerzitetima u Strazburu i Gisenu, gde predaje fiziku i teorijsku fiziku. Na univerzitetu u Vircburgu, čiji rektor kasnije postaje, predaje eksperimentalnu fiziku. Na ovom univerzitetu otkriva rendgensko zračenje, a 1901. godine za ovo otkriće dobija prvu Nobelovu nagradu za fiziku. Rendgen 1900. godine prelazi na univerzitet u Minhenu, na kome predaje do kraja života.

Maks fon Laue (Max von Laue, 1879–1960), rodio se u Pfafendorfu (kod Koblenca, Nemačka). Bio je Plankov student i profesor u Cirihu, Frankfurtu, Berlinu i od 1946. godine direktor Instituta za fizičku hemiju i elektrohemiju u Berlinu. Njegov predlog da se kristali ozrače *x*-zracima prihvatili su Valter Fridrih (Walter Friedrich) i Paul Kniping (Paul Knipping) 1912. godine. Za objašnjenje opažene interferencione slike Laue je 1914. godine dobio Nobelovu nagradu za fiziku. Time je definitivno utvrđena talasna priroda *x*-zraka i prostorno periodična struktura kristala.

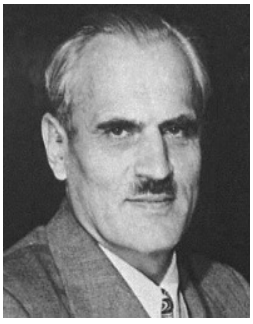


Ser Viliem Henri Brag (Sir William Henry Bragg, 1862–1942), rodio se u Vestvardu, Velika Britanija. Studirao je matematiku na Kembridžu a takođe i fiziku u čuvenoj Kevendiš laboratoriji. Kasnije postaje profesor fizike u Adelaidi (Australija), na Lidsu i na London koledžu, a hemiju predaje na Kraljevskom institutu. Bavi se istraživanjima u različitim oblastima fizike a do velikog otkrića dolazi 1913. i 1914. godine, kada, zajedno sa sinom Lorensom, postavlja temelje nove grane nauke, analize kristalne strukture pomoću *x*-zračenja. Otac i sin Brag pronalaze da se *x*-zračenje može koristiti za sistematsko izučavanje strukture kristala. Za ovo otkriće, Henri i Lorens Brag nagrađeni su 1915. godine Nobelovom nagradom za fiziku.



Ser Viliem Lorens Brag (Sir William Laureance Bragg, 1890–1971), sin je čuvenog fizičara H. Braga. Rođen je u Adelaidi. Godine 1919. postaje profesor u Mančesteru, a 1937. postaje direktor nacionalne fizičke laboratorije. Od 1938. je profesor u Kembridžu, a od 1953. na Kraljevskom institutu u Londonu. Kao dvadesetpetogodišnjak, zajedno sa svojim ocem H. Bragom, otkriva jednostavan i elegantan metod za određivanje talasne dužine rendgenskog zračenja difrakcijom na kristalima a samim tim postavlja i temelje metode za ispitivanje strukture kristala pomoću rendgenskog zračenja, rendgenske spektroskopije. Za ovo otkriće, zajedno s ocem H. Bragom, dobija 1915. godine Nobelovu nagradu za fiziku.

Henri Mozli (Henry Moseley, 1887–1915) je britanski hemičar. Raderfordov je učenik a briljantno je primenio *x*-zračenje na ispitivanje atomske strukture. Odredio je, metodom difrakcije na kristalima, frekvencije rendgenskog zračenja velikog broja hemijskih elemenata, od aluminijuma do zlata, i pokazao da su kvadratni koreni frekvencija linearna funkcija jedne veličine koju je označio sa Q, „a koja raste za konstantni iznos od jednog elementa do drugog". Zaključio je da ta količina može samo da bude naelektrisanje atomskog jezgra i da ona odgovara rednom broju mesta koje određeni hemijski element zauzima u periodnom sistemu elemenata. Mozli je sa 28 godina poginuo u bici na Galipolju u Prvom svetskom ratu.



Artur Holi Kompton (Artur Holly Compton, 1892–1962), rodio se u Vusteru (Ohajo, SAD) i doktorirao na Prinstonskom univerzitetu 1916. godine. Godine 1920. postaje profesor Vašington univerziteta u Sent Luisu, a 1923. Univerziteta u Čikagu. Od 1942. do 1945. godine bio je direktor Plutonijumskog istraživačkog projekta na Čikaškom univerzitetu a od 1945. do 1953. godine bio je i rektor Vašington univerziteta u Sent Luisu. Godine 1923, pretpostavljajući da foton poseduje određeni impuls, uspeo je da objasni promenu talasne dužine rendgenskih zraka pri rasejanju sa materije. Takođe, on je prvi naučnik koji je dokazao totalnu refleksiju *x*-zraka. Isto tako, detaljno se bavio istraživanjem kosmičkih zraka. Za pronalazak efekta koji nosi njegovo ime Kompton je 1927. godine dobio Nobelovu nagradu za fiziku.

8. KORPUSKULARNO-TALASNI DUALIZAM

8.1 DE BROLJIJEVA JEDNAČINA

U prethodnim poglavljima razmatrali smo pojave u kojima se ispoljavaju kvantni uticaji i čestična svojstva elektromagnetnog zračenja. Tako je Plank pojavu zračenja crnog tela razjasnio uvođenjem pretpostavke da energije oscilatora, koji emituju zračenje, moraju da budu diskretne, kvantovane. Te energije izražavaju se kao celobrojni umnošci veličine hv, gde je h nova osnovna konstanta kojom se označava jedinica, ili kvant, dejstva. Tako je početkom 20. veka u fiziku uvedeno shvatanje o „čestičnosti" energije uporedo sa starom idejom o čestičnosti materije. Polazeći od diskretnosti energije i od pojma kvanta dejstva, pored zračenja crnog tela razrešeni su i drugi krupni problemi u fizici. Na primer, objašnjeni su stabilnost atoma i fotoelektrični efekt. Usvajajući i uopštavajući Plankovu ideju o diskretnosti energije, Ajnštajn je objasnio fotoelektrični efekt tako što je pretpostavio da svetlost predstavlja mlaz diskretnih porcija energije, fotona. Slično, objašnjenje Komptonovog efekta zasnovano je na pretpostavci da fotonima mogu da se pripišu i „čestična" svojstva. Na primer, impuls, fotona kao čestice, p, može da se izrazi preko talasnih parametara, frekvencije, ν, talasne dužine, λ, i brzine talasa (svetlosti) c:

$$p = \frac{hv}{c} = \frac{h}{\lambda}. \tag{8.1.1}$$

Kao i pre, h je Plankova konstantna. Ovi primeri pokazuju to da elektromagnetni talasi ispoljavaju dvojaku (dualnu) prirodu, čestičnu i talasnu.

Dvojstvo u smislu čestičnog i talasnog, već prihvaćeno za fotone, tj. za elektro-magnetne talase, Luj de Brolji (Prince Louis-Victor de Broglie, 1892–1987, za otkriće talasne prirode elektrona dobio je Nobelovu nagradu za fiziku 1929. godine), je 1924. godine uopštio i primenio na materijalne čestice. On je, postulirajući talase materije, svakoj čestici koja ima impuls $\vec{p} = m\vec{\upsilon}$, gde je m masa, a $\vec{\upsilon}$ brzina, pridružio talas čija je talasna dužina λ. Pri tome je veza između talasne dužine i impulsa materijalne čestice, utvrđena istim izrazom kao i za fotone, jednačina (8.1.1):

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\upsilon}. \tag{8.1.2}$$

Izraz (8.1.2) se naziva De Broljijeva jednačina i od suštinskog je značaja u kvantnoj mehanici. Ovom jednačinom izražava se dvojnost čestica – talas. Pri tome se podrazumeva da se dvojnost javlja kao opšte svojstvo svih pojava – onih koje klasična fizika zove talasima, kao i onih koji se smatraju česticama. Sam De Brolji kaže:

„Ukratko, teorija savremene atomske fizike počiva na novim shvatanjima čestica i njima pridruženih talasa. Ova nova shvatanja postepeno su se nametnula otkrićem dvostruke prirode svetlosti; primenjena zatim na materijalne čestice, ova logika, potpuno izmenivši našu predstavu o česticama uvođenjem u teoriju materije svojstva dvojnosti (talas-čestica) otkrivenog najpre kod svetlosti, omogućila nam je da najzad sačinimo tačne teorije o atomskim pojavama".

8.1.1 Eksperimentalna potvrda De Broljijeve hipoteze

De Broljijeva jednačina potvrđena je nizom eksperimenata. Prvi pokušaji da se De Broljijeva jednačina potvrdi bili su usmereni na eksperimente u kojima bi čestice ispoljile talasna svojstva, dakle, na opažanje interferencije i difrakcije materijalnih čestica. Na primer, mlaz elektrona koji pod dejstvom napona U stiče kinetičku energiju T:

$$T = \frac{m\upsilon^2}{2} = eU$$

(m, υ i e su masa, brzina i naelektrisanje elektrona, redom) odnosno impuls $\vec{p}$:

$$|\vec{p}| = \sqrt{2meU}$$

po De Broljijevoj hipotezi ima talasnu dužinu λ:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meU}}. \tag{8.1.3}$$

Ako je De Broljijeva hipoteza ispravna, mlaz treba da daje **iste** difrakcione slike posle nailaska na odgovarajući difrakcioni element, kakve bi nastale difrakcijom elektromagnetnih talasa iste talasne dužine. Talasi se primetno difraktuju samo onda kada je pukotina kroz koju prolaze istog reda veličine kao njihove talasne dužine. Ispitaćemo sada kolike mogu da budu talasne dužine elektronima pridruženih talasa. Kada se u jednačini (8.1.3) zamene brojne vrednosti prirodnih konstanti m, e i h u SI sistemu jedinica, dobija se jednačina:

$$\lambda = \frac{1,225}{\sqrt{U}}(nm) \tag{8.1.4}$$

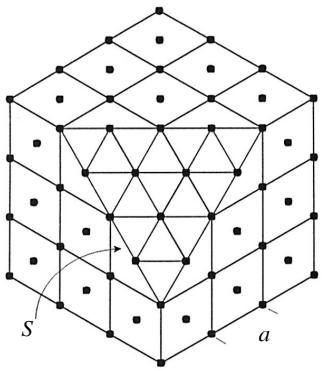
pomoću koje lako možemo da izračunamo talasnu dužinu elektrona (u nanometrima, 1 nm=10^{-9} m), kada je u jednačinu (8.1.4) uvrstimo vrednosti ubrzavajućeg napona u voltima. U sledećoj tabeli prikazano je nekoliko vrednosti parova λ i U:

Tabela 8.1.1 Talasne dužine pridružene elektronima

U(V)	10	50	100	1000	2000	4000	8000	10^4
λ (nm)	0,39	0,17	0,12	0,039	0,027	0,019	0,014	0,0039.

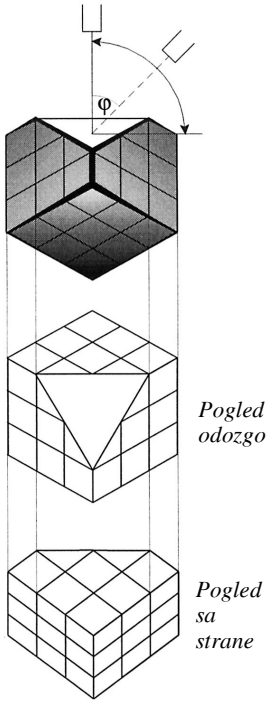
Kao što se iz tabele vidi, pri naponima koji nisu suviše veliki, elektroni stiču takav impuls kojem prema De Broljijevoj jednačini odgovara pridružena talasna dužina reda veličine angstrema (1 nm = $10\mathring{A}$). Talasnu dužinu ovog reda veličine imaju i x-zraci. U narednom delu biće reči o eksperimentima rasejavanja elektrona na kristalnoj rešetki koji su izvedeni u uverenju da bi „elektronski talasi" mogli da se difraktuju na kristalnoj rešetki na isti način kako se to događa sa x-zračenjem.

8.1.2 Devison-Džermerov eksperiment



Slika 8.1.1 Kristal nikla - raspored atoma.

K. Dž. Devison i i L. H. Džermer su izveli 1927. godine prvi eksperiment kojim je potvrđena De Broljijeva hipoteza. Ideja eksperimenta bila je da se utvrdi da li se elektroni na monokristalu nekog elementa difraktuju poput x-zračenja, i da se na osnovu toga proveri De Broljijeva hipoteza. Eksperiment je izveden u visokom vakuumu da bi se izbegli sudari elektrona sa molekulima iz vazduha. Usijana volframova žica emituje elektrone koji se, ubrzani električnim poljem koje stvara ubrzavajući napon, usmeravaju na površinu monokristala nikla. Kristal nikla ima strukturu površinski centrirane kubne rešetke, a za potrebe eksperimenta sa jedne strane je zasečen tako da snop elektrona pada normalno na ravni sa Milerovim indeksima (1, 1, 1). Raspored atoma nikla na površini kristala prikazan je na Slici 8.1.1, a šema eksperimentalnog uređaja na Slici 8.1.2. Mlaz elektrona vertikalno pada na ravan kristala a rasejane elektrone detektuje jonizaciona komora (kolektor), koja rotacijom u ravni upadnog mlaza može da meri intenzitet rasejanih elektrona pod različitim uglovima φ, merenim u odnosu na pravac upadnog snopa, Slika 8.1.2.



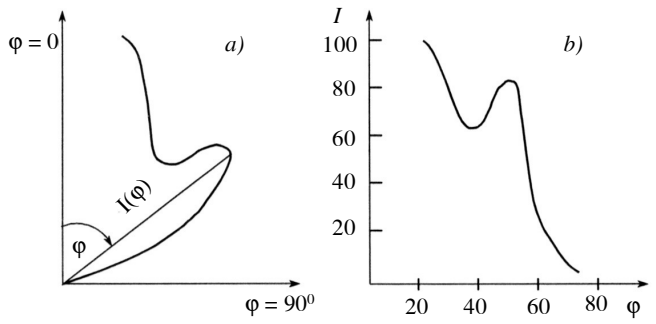
Slika 8.1.2 Šema Devison-Džermerovog eksperimenta.

Promenljivi napon koji ubrzava elektrone je reda nekoliko desetina volti. Naročito intenzivnu difrakciju Devison i Džermer su zapazili pri naponu od 54 V, pod uglom od 50°. Zavisnost intenziteta difraktovanih elektrona od ugla φ, pri konstantnom ubrzavajućem naponu, prikazana je polarnim dijagramom na Slici 8.1.3a. Za upoređenje, na Slici 8.1.3b prikazana je zavisnost intenziteta rasejanih elektrona od ugla φ, u pravouglom koordinatnom sistemu.

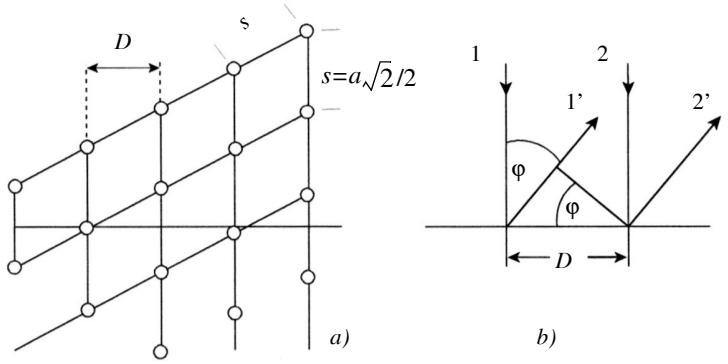
Intenzivna difrakcija (rasejavanje) elektrona u određenom pravcu, može da se shvati kao talasna pojava i da se protumači na taj način. U prvoj aproksimaciji smatraćemo da se elekronski talasi difraktuju samo sa površine kristala. Tada, po analogiji sa Bragovom jednačinom, do konstruktivne interferencije (elektronskih) talasa, rasejanih atomima nikla sa površine kristala u određenom pravcu dolazi kada je razlika njihovih puteva, δ, jednaka celobrojnom umnošku talasnih dužina, $n\lambda$.

Sa Slike 8.1.4b se vidi da putna razlika iznosi $D\sin\varphi$, pa je, prema tome, uslov za konstruktivnu interferenciju:

$$\delta = D\sin\varphi = n\lambda. \tag{8.1.5}$$



Slika 8.1.3 Zavisnost intenziteta rasejanih elektrona od ugla rasejavanja φ: a) *u* polarnom koordinatnom sistemu; b) u pravouglom koordinatnom sistemu.



Slika 8.1.4 Rasejavanje elektrona sa nikla: a) površina kristala; b) uslov za konstruktivnu interferenciju.

Veličina D odgovara rastojanju između ekvidistantnih linija koje spajaju nizove atoma na površini kristala, dakle u ravni normalnoj na ravan upadnog i difraktovanog snopa, Slika 8.1.4a. Sa Slike 8.1.4a sledi da je D visina ravnostranog

trougla čija je stranica s, $D = s\sqrt{3}/2$. Prema Slici 8.1.1 s odgovara polovini male dijagonale elementarne ćelije nikla, $s = a\sqrt{2}/2$. Za kristalnu rešetku nikla (ivica elementarne ćelije) $a = 0{,}351$ nm, pa je:

$$D = 3{,}51 \times \frac{\sqrt{2}}{2} \times \frac{\sqrt{3}}{2} = 0{,}215 \text{ nm}.$$

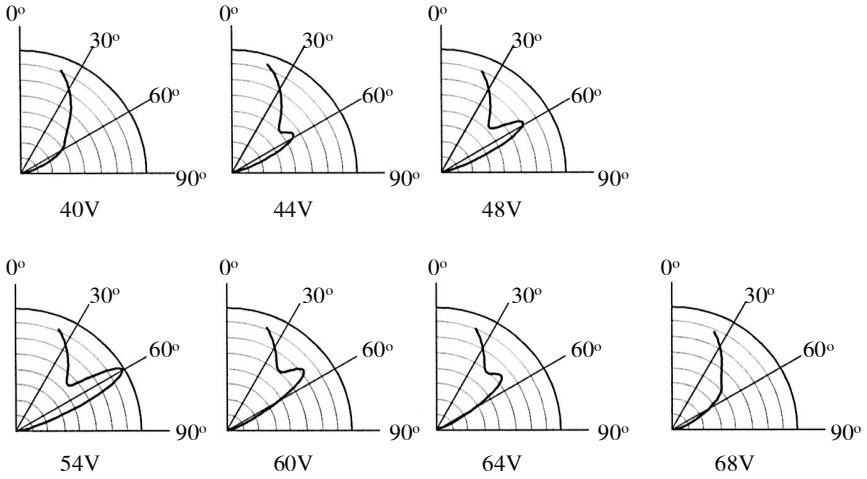
Zamenom dobijene vrednosti za D, i ugla φ za koji se dobija intenzivna difrakcija ($\varphi = 50°$), u jednačini (8.1.5), nalazimo talasnu dužinu rasejanih elektrona:

$$\lambda_1 = 0{,}215 \sin 50° = 0{,}215 \times 0{,}766 = 0{,}165 \text{ nm}. \tag{8.1.6}$$

Za iste elektrone, ubrzane naponom od 54 V, prema De Broljijevoj jednačini, izraz (8.1.4), nalazimo:

$$\lambda_2 = \frac{1{,}225}{\sqrt{U}} = \frac{1{,}225}{\sqrt{54}} = 0{,}1667 \text{ nm}. \tag{8.1.7}$$

Dobro slaganje između vrednosti talasne dužine λ_2, dobijene iz De Broljijeve jednačina i λ_1, izračunate iz uslova za konstruktivnu interferenciju talasa, potvrđuje valjanost De Broljijeve hipoteze.



Slika 8.1.5 Polarni dijagram rasejanih elektrona sa nikla. Slike pokazuju zavisnost intenziteta rasejanih elektrona od ubrzavajućeg napona.

Ovako pojednostavljena teorija, koja razmatra rasejanje samo sa atoma na površini kristala, nije u stanju da potpuno objasni Devison-Džermerov eksperiment. Kada bi se elektroni difraktovali samo sa površine kristala, tada bi do konstruktivne interferencije dolazilo kada se ispuni uslov (8.1.5), bez obzira na veličinu ubrzavajućeg napona. Međutim, Devison i Džermer su utvrdili da je difrakcioni maksimum vrlo slabo izražen za napone različite od 54 V, Slika 8.1.5. Dakle, nije dovoljno razmatrati rasejanje sa površine kristala već treba uzeti u obzir, kao u slučaju x-zračenja,

i difrakciju sa atoma koji leže u dubini kristala. Slika 8.1.6 pokazuje relativne odnose između upadnih elektrona koji padaju normalno na površinu kristala, elektrona rasejanih pod uglom φ, i zamišljenih slojnih ravni kristala sa kojih se upadni elektroni reflektuju. Normalno, u kristalu postoje samo čvorovi (u kojima su, u ovom slučaju, smešteni atomi nikla) a slojne ravni se konstruišu prema potrebi i to tako da svaka ravan prolazi kroz izvestan broj čvorova. Raspored čvorova u svakoj ravni je identičan a rastojanje među slojnim ravnima je dovoljno malo da među njima nema slobodnih čvorova kristalne rešetke. Dakle, difrakcija elektrona sa atoma u kristalnoj rešetki, pod uglom φ, može se shvatiti kao refleksija elektrona sa slojnih ravni koje su konstruisane pod uglom α u odnosu na površinu kristala. Zbog jednostavnosti, razmatramo refleksiju sa slojnih ravni koje su normalne na ravan crteža tako da se na crtež projektuju kao niz kosih linija. S obzirom na to da su slojne ravni povučene tako da se upadni snop sa njih reflektuje, među uglovima α i φ postoji očigledna veza, $\varphi = 2\alpha$, Slika 8.1.6. Do pojave konstruktivne interferencije (jakog mlaza difraktovanih elektrona) dolazi kada se ispuni Bragov uslov, jednačina (5.2.6):

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

gde je d rastojanje među slojnim ravnima sa kojih dolazi do refleksije a ugao θ se meri od slojne ravni do upadnog zraka, Slika 8.1.6. Rastojanje d može da se izrazi preko rastojanja među atomima na površini kristala, D, i ugla koji slojne ravni zaklapaju sa površinom kristala, α:

$$d = D\sin\alpha . \tag{8.1.8}$$

S obzirom na to da su uglovi θ i α komplementrani, $\theta + \alpha = \pi/2$, Bragov uslov za konstruktivnu interferenciju možemo da napišemo u obliku:

$$2d\sin(\pi/2-\alpha) = 2d\cos\alpha = n\lambda . \tag{8.1.9}$$

Zamenom d iz (8.1.8) u (8.1.9) nalazimo da je:

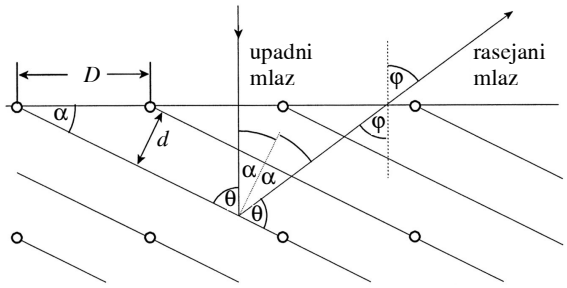
$$2D\sin\alpha\cos\alpha = D\sin 2\alpha = n\lambda$$

a imajući u vidu da je $2\alpha = \varphi$, Slika 8.1.6, sledi:

$$D\sin\varphi = n\lambda.$$

Poslednja jednakost je ista kao i jednačina (8.1.5), dakle, uslov za difrakciju je isti bez obzira na to da li se razmatra rasejanje samo sa površine kristala ili i po njegovoj zapremini. Međutim, postoji bitna razlika između dva slučaja difrakcije. Za difrakciju po zapremini kristala, pored uslova (8.1.9) treba da se ispuni još i uslov da slojne ravni konstruisane pod uglom α imaju dovoljno veliku retikularnu gustinu[10] da se refleksija sa njih ispolji kao očigledni maksimum. Ako ovakve ravni ne mogu da

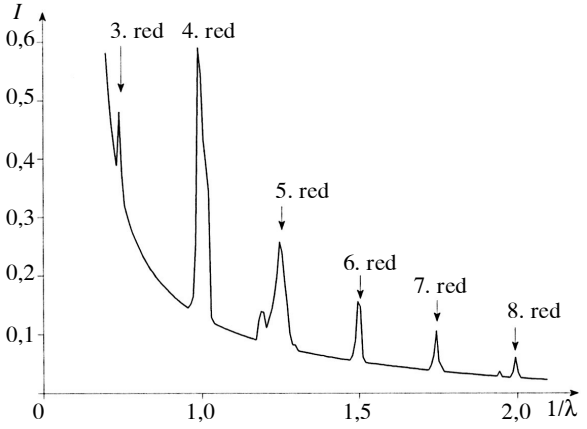
[10] Retikularnu gustinu definišemo kao broj atoma po jedinici dužine.



Slika 8.1.6 Refleksija elektronskih talasa sa pararelnih ravni koje zaklapaju ugao α sa površinom kristala.

se povuku, tada se izraziti difrakcioni maksimum i ne pojavljuje čak i kada je ispunjen Bragov uslov. Prema tome, uslov za konstruktivnu interferenciju (8.1.5) jeste potreban ali ne i dovoljan za nastajanje difrakcionog maksimuma. Dodatni uslov je da ravni pod uglom α u odnosu na površinu kristala (uvek je $2\alpha = \varphi$) imaju dovoljno veliki broj atoma po jedinici površine. Dva uslova za konstruktivnu interferenciju mogu se izraziti na sledeći način:

$$\lambda = \frac{D\sin\varphi}{n} = \frac{D\sin 2\alpha}{n}. \qquad (8.1.10)$$



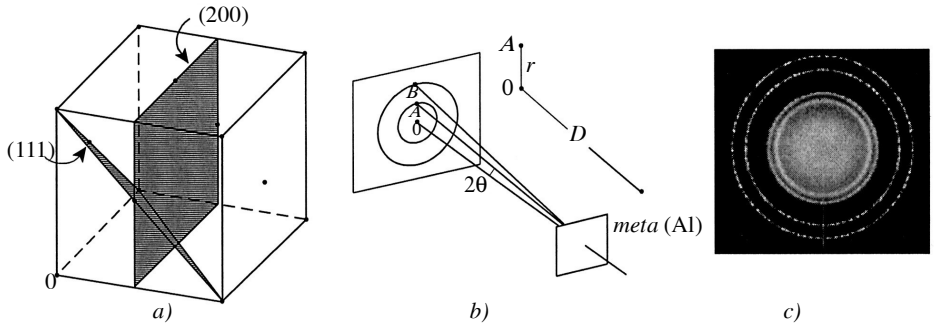
Slika 8.1.7 Zavisnost intenziteta difraktovanog snopa od talasne dužine, pri stalnom uglu difrakcije φ.

Iz jednačine (8.1.10) sledi da serija difrakcionih maksimuma može da se dobije ako se intenzitet snopa rasejanog pod konstantnim uglom φ meri u funkciji talasne dužine upadnih elektrona. Svaki maksimum bi odgovarao jednoj vrednosti celobrojnog faktora *n*. Da bi proverili i ovaj aspekt izraza (8.1.10) Devison i Džermer su merili zavisnost intenziteta rasejanih elektrona u funkciji njihove talasne dužine pri konstantnom uglu rasejanja, Slika 8.1.7. Zaista, opažena je serija difrakcionih maksimuma pri čemu svaki maksimum odgovara određenom redu difrakcije *n*. Time je dodatno potvrđena talasna priroda rasejanja elektrona, tj. De Broljijeva hipoteza da se materijalnim česticama mogu pripisati i talasna svojstva.

8.1.3 Difrakcija elektrona – Tomsonova metoda

Dž. P. Tomson je 1927. godine, skoro istovremeno kad i Devison i Džermer, izveo seriju eksperimenata kojima je, takođe, potvrđeno da čestice imaju talasna svojstva. Tomson je struju brzih elektrona propuštao kroz vrlo tanke metalne listiće a difraktovani elektronski snop registrovao na fotografskoj ploči. Posle razvijanja, na fotoploči uočavaju se serije koncentričnih krugova, Slika 8.1.8c, kakve bi proizveli *x*-zraci iste talasne dužine, Slika 8.1.9b, što ukazuje na talasnu prirodu elektronskog mlaza. Difrakciona slika može da se poremeti pomoću magneta, Slika 8.1.9c, što potvrđuje da se zaista difraktuju elektroni, a ne možda neko drugo, tokom eksperimenta, zaostalo zračenje.

Za razliku od Devison-Džermerovog, u Tomsonovom eksperimentu koriste se elektroni velikih energija, 10 i više k*e*V, a difrakcioni element nije monokristal već polikristalni listić u kome je veliki broj kristalića proizvoljno orijentisan. Prema tome, Tomsonova metoda je ekvivalentna Debaj-Šererovoj metodi kod difrakcije *x*-zračenja. U jednoj varijanti Tomsonovog eksperimenta elektroni ubrzani naponom od nekoliko hiljada volti difraktuju se sa pljosni haotično usmerenih kristalića aluminijuma. Tada, za svaku energiju elektrona (i za odgovarajuću De Broljijevu talasnu dužinu elektrona) mogu da se nađu mikrokristali koji u prostoru zauzimaju položaj takav da zadovoljavaju Bragov uslov za neki niz reflektujućih ravni. Kao rezultat ovakve difrakcije na zaklonu se dobija difrakciona slika koju čine prstenovi različitih poluprečnika, Slika 8.1.8b. Aluminijum ima strukturu površinske centrirane kubne rešetke, Slika 8.1.8a. Rastojanje d među slojnim ravnima sa Milerovim indeksima (h, k, l), za kubnu rešetku nalazimo iz relacije:



Slika 8.1.8 Šematski prikaz difrakcije elektrona na aluminijumu: a) slojne ravni u kristalu; b) geometrijski odnosi između snopa elektrona, mete i fotografske ploče; c) difrakciona slika.

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}. \tag{8.1.11}$$

gde je a dužina ivice elementarne ćelije (poznata iz merenja *x*-zracima). Uvešćemo brojeve $nh = H$, $nk = K$ i $nl = L$, pomoću kojih n-ti red refleksije od ravni (h, k, l) možemo da shvatimo kao refleksiju prvog reda od ravni sa Milerovim indeksima (H, K, L). Sledi:

$$d = \frac{na}{\sqrt{H^2 + K^2 + L^2}}. \tag{8.1.12}$$

Kombinovanjem izraza (8.1.12) i Bragove jednačine za konstruktivnu interferenciju (7.2.6), dobija se:

$$\lambda = \frac{2a\sin\theta}{\sqrt{H^2 + K^2 + L^2}}. \tag{8.1.13}$$

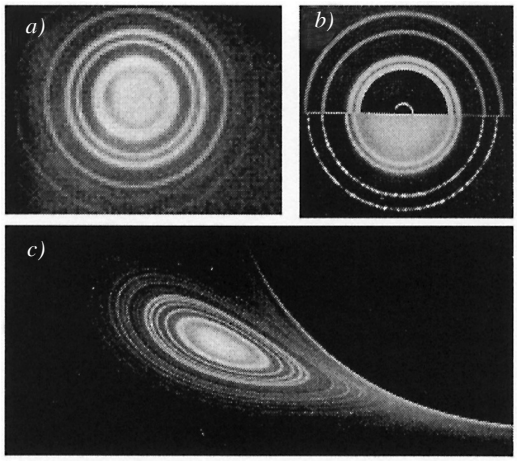
Kao što smo već pomenuli, dobijeni sistem koncentričnih krugova, Slika 8.1.8c, može da se shvati kao rezultat konstruktivne interferencije elektronskih talasa, koji nastaju difrakcijom sa ravni sa različitim Milerovim indeksima. Primetimo da je ugao između upadnog i difraktovanog elektronskog snopa jednak dvostrukom uglu θ (ugao između upadnog snopa i ravni kristala) iz Bragove jednačine. Talasna dužina difraktovanih talasa određuje se na osnovu poznate veze između veličina koje se eksperimentalno mere i parametara uređaja. Tako sa Slike 8.1.8b sledi veza između ugla 2θ, rastojanja od mete (aluminijumska folija), do zaklona D i poluprečnika prstena r. Kada je ugao θ mali, važi:

$$tg2\theta \approx \sin 2\theta \approx 2\sin\theta \approx \frac{r}{D}. \tag{8.1.14}$$

Pod ovim uslovom jednačina (8.1.13) postaje:

$$\lambda = \frac{ar}{D}\frac{1}{\sqrt{H^2 + K^2 + L^2}} \tag{8.1.15}$$

na osnovu čega možemo da izračunamo talasnu dužinu elektrona ako je poznata ivica elementarne ćelije a. Na ovaj način određena talasna dužina elektrona može da se uporedi sa talasnom dužinom elektrona koja je dobijena iz De Broljijeve jednačine.

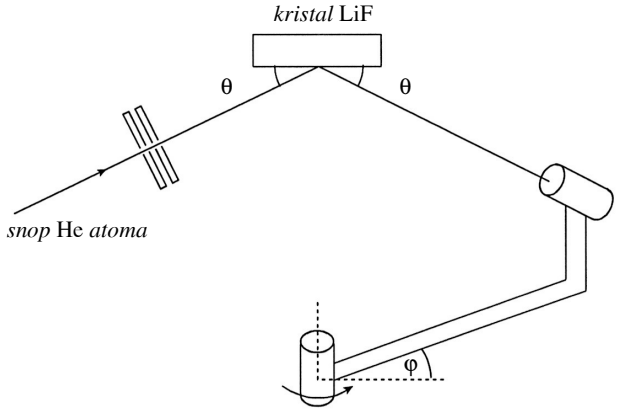


Slika 8.1.9 Difrakcione slike rasejanja elektrona: a) Tomsonova slika rasejanja elektrona sa tankog listića zlata; b) kombinovana slika rasejanja elektrona (dole) i *x*-zraka (gore) slične talasne dužine sa listića aluminijuma; c) difrakciona slika dobijena rasejanjem elektrona energije 40 k*eV* pri prolazu kroz prah cink oksida. Izobličenje slike je prouzokovano malim magnetom koji je stavljen između uzorka i fotogafske ploče. Da slika potiče od rasejanja *x*-zraka ne bi došlo do izobličenja pod uticajem magnetnog polja.

Na Slici 8.1.9 prikazani su primeri rasejanja elektrona Tomsonovom metodom.

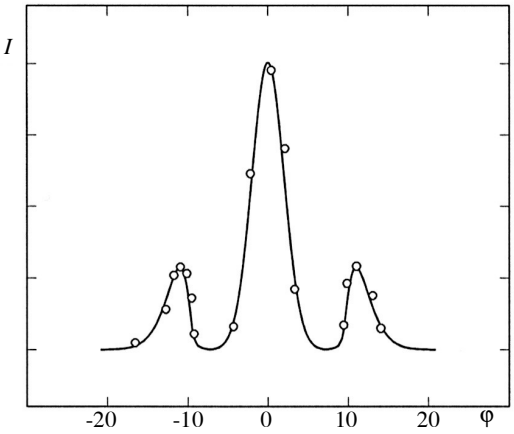
8.1.4 Difrakcija neutralnih atoma

Eksperimentom difrakcije atoma helijuma na kristalu litijum fluorida, LiF, Esterman i Štern dokazali su talasna svojstva atoma. Eksperiment je u osnovi iste vrste kao onaj koji su izveli Devison i Džermer. Kako helijumovi atomi nisu mogli da se ubrzaju do tačno određene energije, upotrebljen je snop helijumovih atoma na sobnoj temperaturi. O brzinama atoma helijuma može da se sudi na osnovu ravnotežne (Maksvelove) raspodele čestica po brzinama. Srednjoj brzini atoma helijuma (prema Maksveloj raspodeli), na temperaturi od oko 20 °C, odgovarala bi kinetička energija od oko 0,03 eV ($4{,}8 \times 10^{-21}$ J), pa bi na osnovu De Broljijeve jednačine, talasna dužina λ, pridružena atomima He ove energije, iznosila oko 1 Å (tačnije 0,8 Å).



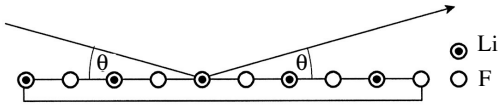
Slika 8.1.10 Šema eksperimentalnog uređaja za difrakciju atoma helijuma na kristalu LiF, prema Estermanu i Šternu.

Šema eksperimentalnog uređaja prikazana je na Slici 8.1.10. Kolimisani snop helijumovih atoma pada na površinu kristala pod uglom θ. Detektor, izvanredno osetljiv manometar, postavljen je pod istim uglom θ, a može da se okreće i oko vertikalne ose za (azimutni) ugao φ (ugao u ravni koja je normalna na ravan papira). Pri uglu $\varphi = 0°$, upadni i reflektovani snop se nalazi u ravni papira.



Slika 8.1.11 Eksperimentalni rezultati. Središnji maksimum odgovara uglu $\varphi = 0°$, dok sledeći maksimum pri $\varphi = 11°$, odgovara difrakciji prvog reda.

Zavisnost intenziteta rasejanog snopa od ugla φ (i pri stalnom uglu θ = 18,5°), prikazana je na Slici 8.1.11. Prodiranje atoma (helijuma) sa tzv. termalnom energijom u unutrašnjost kristala može da se smatra zanemarljivim, pa u ovom slučaju (za razliku od Devison-Džermerovog ogleda) eksperiment može da se protumači rasejavanjem atoma helijuma sa dvodimenzione kristalne rešetke površine kristala.

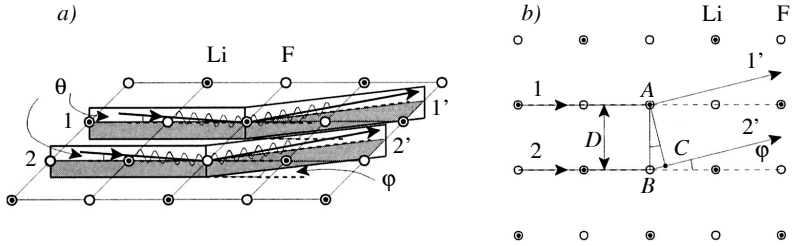


Slika 8.1.12 Upadni i difraktovani snop helijumovih atoma, pogled sa strane.

Na slikama 8.1.12 i 8.1.13 prikazana je difrakcija snopa helijumovih atoma na površini kristala LiF. Upadni zraci 1 i 2 pod malim uglom θ padaju na površinu kristala i zbog rasejanja skreću sa prvobitnog pravca pod uglom φ, Slika 8.1.13. Za dovoljno mali upadni ugao θ ($\cos\theta \sim 1$) trodimenzioni problem koji razmatramo može se svesti na problem u ravni. Potražimo pomoću Slike 8.1.13b uslov za konstruktivnu interferenciju zrakova 1´ i 2´. Zrak 1´ nastaje posle difrakcije zraka 1 na atomu *A*, a zrak 2´ posle difrakcije na atomu *B*. Da bi došlo do konstruktivne interferencije razlika puteva zrakova 1´ i 2´ koja iznosi *BC*, treba da bude jednaka celobrojnom umnošku talasnih dužina, $n\lambda$. Iz trougla *ABC* sa Slike 8.1.13b neposredno dobijamo:

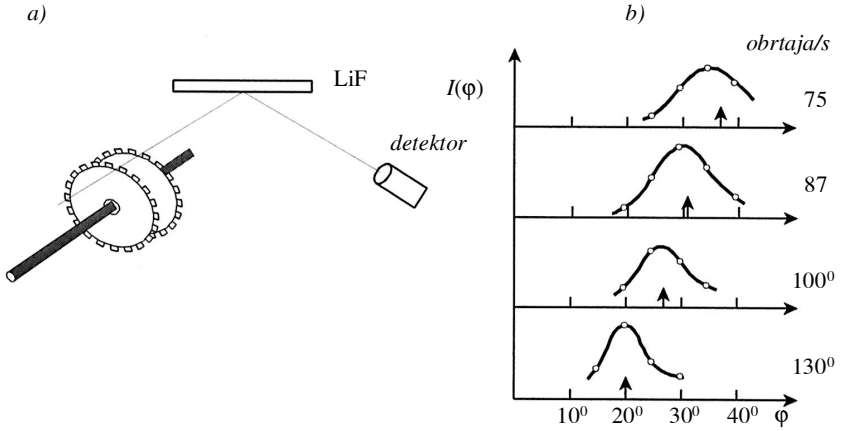
$$n\lambda = D\sin\varphi. \tag{8.1.16}$$

Talasna dužina helijumovih atoma koja sledi iz jednačine (8.1.16) može da se uporedi s onom koja se dobija iz De Broljijeve jednačine ako se za kinetičku energiju helijumovih atoma uzme srednja energija koja sledi iz Maksvel-Bolcmanove raspodele.



Slika 8.1.13 Difrakcija snopa helijumovih atoma na površini kristala LiF: a) pogled odozgo; b) pogled sa strane. Može da se pokaže da se pri malom uglu θ, difrakcioni maksimum javlja pri uslovu $\lambda = D\sin\varphi$.

Difrakcioni maksimum prvog reda dobijen je za ugao $\varphi = 11°$, pa se pri vrednosti $D = 4{,}02$ Å za talasnu dužinu λ dobija, na osnovu jednačine (8.1.16), vrednost 0,77 Å. Iz De Broljijeve jednačine, pri energiji helijumovih atoma od 0,03 eV (srednja energija po Maksvel-Bolcmanovoj raspodeli), dobija se vrednost za $\lambda = 0{,}8$ Å, što je sasvim uporedivo sa eksperimentalno dobijenom vrednošću.

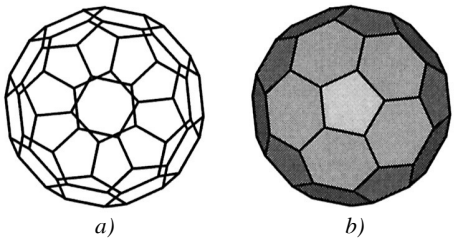


Slika 8.1.14 Šematski prikaz difrakcije atoma helijuma na *L* i *F*: a) birač brzina; b) pri većoj brzini okretanja birača brzine, izdvajaju se atomi sa većim brzinama i zapaža se pomeranje difrakcionog maksimuma ka nižim uglovima-manje λ-kao što predviđa De Broljijeva jednačina.

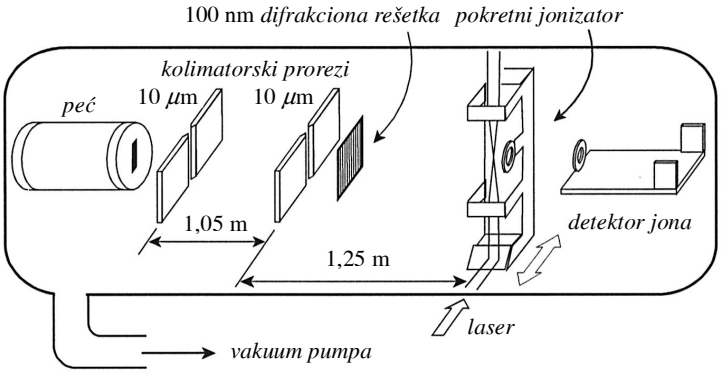
Stern i saradnici uveli su kasnije finiju verziju istog eksperimenta, uvodeći selektora brzina, Slika 8.1.14a. To su bila dva točkića sa prorezima, postavljena jedan blizu drugog, a mogli su da se okreću različitim brzinama. Pri određenoj brzini okretanja ovog selektora brzina, u sistem su ulazili atomi određenih brzina. Na Slici 8.1.14b prikazani su rezultati eksperimenta. Pri većoj brzini okretanja selektora brzina, izdvajaju se atomi sa većim brzinama i zapaža se pomeranje difrakcionog maksimuma ka nižim uglovima φ (manje λ) u saglasnosti sa De Broljijevom jednačinom.

8.1.5 Difrakcija molekula

Pitanje da li se može opaziti talasna priroda makroskopskih objekata dugo je ostalo bez odgovora, uglavnom zbog velikih eksperimentalnih problema. Naime, talasna dužina čestice opada sa porastom njene mase pa je efekte difrakcije mnogo teže opaziti nego kod lakših čestica. Zbog toga je trebalo sačekati skoro osamdeset godina da se De Broljijeva hipoteza i jednačina eksperimentalno potvrde rasejanjem molekula. Godine 1999. austrijski istraživač A. Zelinger (Anton Zellinger) sa saradnicima uspeo je da opazi eksperimentalno difrakciju molekula fulerena, C_{60}, Slika 8.1.15, na veštačkoj difrakcionoj rešetki.

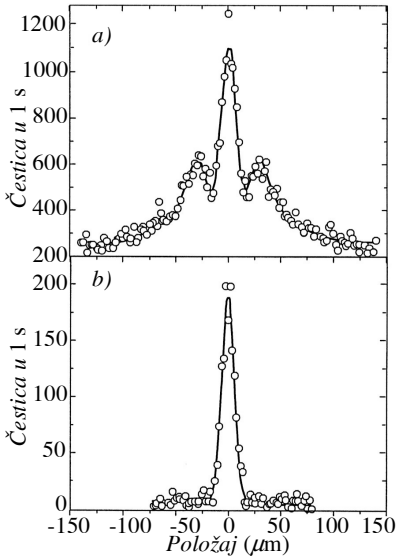


Slika 8.1.15 Molekul fulerena sastoji se od 60 ugljenikovih atoma, C_{60}: a) strukturna formula; b) molekul fulerena izgleda poput fudbalske lopte, bubamare. Atomi ugljenika smešteni su u rogljevima gde se sreću tri šava. Molekul je dobio ime po Bakmister Fuleru, poznatom arhitekti koji je pravio kupole slične konstrukcije. Ponekad se naziva i fudbalen, zbog sličnosti sa fudbalskom loptom.



Slika 8.1.16 Aparatura za difrakciju molekula fulerena na difrakcionoj rešetki.

Zelingerova aparatura prikazana je na Slici 8.1.16. Da bi se izbegli sudari snopa molekula fulerena sa molekulima iz vazduha, ceo uređaj je zatvoren u komoru koja može dobro da se evakuiše tako da srednji slobodni put molekula fulerena postaje pedeset puta duži od cele putanje snopa (oko dva metra). Molekulski izvor je peć iz koje, nakon sublimacije na 900 ^{0}C, molekuli fulerena izleću kroz malu pukotinu. Usmeravajući (kolimacioni) prorezi sužavaju (kolimišu) molekulski snop tako da svi molekuli padaju na površinu rešetke u vrlo uskom, paralelnom snopu. Difrakciona rešetka od silicijum nitrida, SiN_x, ima proreze od 50 nm sa periodom od 100 nm. Iza rešetke nalazi se fotojonizacioni element koji laserskim snopom jonizuje prispele molekule C_{60}. Laserski zrak je vrlo dobro fokusiran, tako da se jonizuju samo molekuli u žiži prečnika 8 μm. Jonski detektor, na kraju uređaja, svojim negativnim potencijalom privlači C_{60}^+ jone. Joni u detektoru izbijaju elektrone koji se na pogodan način broje. Dakle, broj detektovanih elektrona proporcionalan je broju jona prispelih u fokus laserskog snopa. S obzirom na to da položaj pokretnog foto jonizatora može vrlo tačno da se odredi, to se difrakciona slika neposredno dobija iz zavisnosti broja detektovanih elektrona od položaja fotojonizatora.



Slika 8.1.17 Difrakcija fulerena na difrakcionoj rešetki slicijum nitrida: a) sa rešetkom; b) bez rešetke.

Molekuli fulerena izleću iz peći srednjom brzinom od 220 m/s i prolaskom kroz kolimatore usmeravaju se u paralelnom snopu na difrakcionu rešetku. Rešetka zadržava molekule koji pogode pregradu a propušta samo one koji pogode neki od proreza. Zbog talasne prirode, molekuli koji prođu kroz prorez skreću sa prvobitnog pravca što se registruje pokretnim fotojonizatorom. Laserski zrak jonizuje svaki

molekul koji prođe kroz žižu što se ispoljava kao porast broja registrovanih elektrona u detektoru, pri određenom položaju fotojonizatora. Rezultat eksperimenta, sa rešetkom i bez nje, pokazan je na Slici 8.1.17. Bez rešetke, Slika 8.1.17b, nema skretanja molekulskog snopa, što se vidi kao jasan maksimum na nultom položaju. Sa rešetkom, dolazi do difrakcije i do pojave izraženih maksimuma s obe strane nultog položaja, Slika 8.1.17a. Pojava maksimuma prvog reda na $\pm$ 17μm jasno ukazuje na difrakciju molekula fulerena. Iz poznate mase i brzine molekula nalazi se da je talasna dužina De Broljijevih talasa 2,5 pm ($2{,}5 \times 10^{-12}$m), što se u granicama eksperimentalne greške slaže sa talasnom dužinom izračunatom na osnovu dobijenog interferograma. (Jednostavna teorija difrakcije daje samo dobar red veličine jer ne uzima u obzir raspodelu molekula po brzinama, Van der Valsovu interakciju molekula i rešetke, konačnu širinu snopa itd. Međutim, kada se uzmu u obzir svi eksperimentalni parametri, dobija se izvrsno slaganje između De Broljijeve jednačine i eksperimenta.) Time je De Broljijeva hipoteza eksperimentalno potvrđena i sa složenijim česticama (objektima koji imaju unutrašnju strukturu i unutrašnje stepene slobode za različite oblike kretanja) dakle, i sa česticama koje su po osobinama bliske makroskopskim telima.

8.1.6 Tumačenje Borovog kvantnog uslova pomoću De Broljijeve jednačine

Pokažimo sada da pomoću De Broljijeve ideje može da se objasni Borov kvantni uslov. U Borovoj teoriji vodonikovog atoma koristi se sledeći uslov za određivanje stacionarnih orbita:

$$m\upsilon r = n\frac{h}{2\pi} \tag{8.1.17}$$

gde je $m\upsilon r$ moment impulsa elektrona (m je masa, υ je brzina elektrona, a r je poluprečnik orbite, vektori $\vec{\upsilon}$ i $\vec{r}$ normalni su jedan na drugi), n je ceo broj, a h Plankova konstanta. Preuređivanjem jednačine (8.1.17), dobija se:

$$2\pi r = n\frac{h}{m\upsilon}. \tag{8.1.18}$$

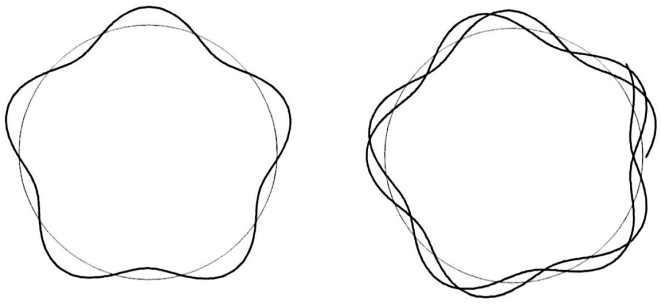
Ako umesto $h/(m\upsilon)$ uvrstimo De Broljijevu talasnu dužinu λ, nalazimo

$$2\pi r = n\lambda\,. \tag{8.1.19}$$

Dakle, obim stacionarne kružne orbite jednak je celobrojnom umnošku De Broljijeve talasne dužine, Slika 8.1.18a. Pri talasnim dužinama (impulsima) za koje uslov (8.1.19) nije ispunjen, dolazi do destruktivne interferencije (talasni maksimumi i minimumi se poništavaju) i takva orbitala postaje nestabilna.

8.1.7 Jednačina De Broljijevih talasa

Polazeći od jednačine monohromatskog ravnog talasa, jednačina (D-3.1.13), izvešćemo izraz za De Broljijeve talase koji predstavljaju česticu energije E i impulsa p i koja se kreće slobodno (van polja sila). Između „čestičnih" odlika E i p i



a) *b)*

Slika 8.1.18 Borov kvantni uslov i De Broljijeva jednačina: a) stacionarna kružna orbita se obrazuje kada je ispunjen uslov (8.1.19); b) za talasne dužine koje ne ispunjavaju uslov orbita je nestacionarna.

„talasnih" parametara, ugaone frekvencije ω (ili linearne frekvencije $\nu = \omega/2\pi$) i talasnog vektora $\vec{k}$ postoje sledeće veze:

$$E = h\nu = h\frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega \tag{8.1.20}$$

gde smo uveli oznaku $\hbar = h/2\pi$. Dalje iz De Broljijeve jednačine i pomoću (D-3.1.6) sledi:

$$|\vec{p}| = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\vec{k}|\,. \tag{8.1.21}$$

Kada se ω iz (8.1.20) i $|\vec{k}|$ (8.1.21) zamene u jednačini ravnog talasa (D-3.1.13) dobija se jednačina De Broljijevog talasa koji označavamo sa ψ i kojim prikazujemo česticu koja se kreće u pravcu x-ose:

$$\psi = \psi_0 e^{i(Et/\hbar - p_x x/\hbar)} = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)}. \tag{8.1.22}$$

U opštem slučaju, za kretanje u anizotropnoj sredini duž proizvoljnog pravca koji sa koordinatnim osama zaklapa uglove α, β i γ, jednačina De Broljijevog talasa glasi:

$$\psi = \psi_0 e^{i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})} = \psi_0 e^{i(\omega t - k_x x - k_y y - k_z z)} = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x - p_y y - p_z z)}. \tag{8.1.23}$$

8.2 ČESTICA KAO TALASNI PAKET

DODATAK 8.2

D-8.2.1 Kompleksni brojevi i kompleksne funkcije

Kompleksni broj z sastoji se od realnog dela a i imaginarnog dela ib:

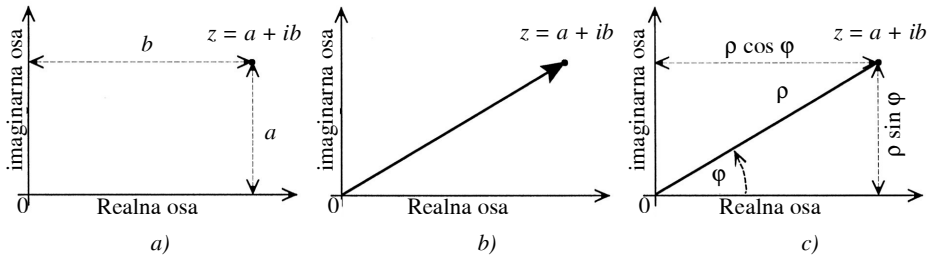
$$z = a + ib$$

gde su a i b realni brojevi, a „i" imaginarna jedinica: $i^2 = -1$.

Slično realnom broju koji može da se predstavi tačkom na brojnoj osi, kompleksni broj može da se predstavi tačkom u ravni, Slika D-8.2.1a. Pošto tački može da se pridruži radijus vektor, to i kompleksni broj može da se predstavi vektorom, Slika D-8.2.1b. Ako se umesto u Dekartovim, kompleksni broj predstavi u polarnim koordinatama, Slika D-8.2.1c, onda u trigonometrijskom obliku isti kompleksni broj može da se napiše kao:

$$z = \rho(\cos\varphi + i\sin\varphi)$$

gde je ρ dužina radijus vektora koja se naziva još i moduo, ili apsolutna vrednost vektora, $\rho = |a|$. Ugao φ (u radijanima!) je argument kompleksnog broja. Veza između parametara *a, b,* ρ i φ ista je kao i između Dekartovih i polarnih koordinata: $a = \rho \sin\varphi$, $b = \rho \cos\varphi$.



Slika D-8.2.1 Predstavljanje kompleksnih brojeva: a) u Dekartovim koordinatama; b) pomoću radijus vektora; c) u polarnim koordinatama.

Korišćenjem Ojlerove formule:

$$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$$

kompleksni broj z može da se predstavi i u eksponencijalnom obliku:

$$z = \rho e^{i\varphi}.$$

I konjugovano kompleksni brojevi mogu da se predstave odgovarajućim oblicima:

$$z = a + ib = \rho(\cos\varphi + i\sin\varphi) = \rho e^{+i\varphi}$$
$$z = a - ib = \rho(\cos\varphi - i\sin\varphi) = \rho e^{-i\varphi}.$$

Na primer, kompleksni broj $1 + i\sqrt{3}$ može da se predstavi u sledećim oblicima:

algebarski oblik $1 + i\sqrt{3} =$

trigonometrijski oblik $= 2\left(\cos\frac{\pi}{3} + i\sin\frac{\pi}{3}\right) =$

ekponencijalni oblik $= 2e^{i\frac{\pi}{3}}.$

Način na koji se kompleksni broj izražava zavisi od problema koji se rešava. Na primer, eksponencijalni oblik najpogodniji je za nalaženje kvadrata modula kompleksnog broja jer se u tom predstavljanju konjugovano kompleksni brojevi razlikuju samo po znaku argumenta:

$$zz^* = \rho e^{+i\varphi}\, \rho e^{-i\varphi} = \rho^2 .$$

Račun s kompleksnim brojevima može da pojednostavi mnoge probleme i rešenja. Na primer, kružnica, čija je jednačina u Dekartovim koordinatama:

$$\frac{x^2}{r^r} + \frac{y^2}{r^2} = 1$$

u kompleksnom obliku je:

$$z = re^{it}$$

gde je z kompleksna funkcija, a t realna promenljiva. Iz poslednje jednačine i geometrijskog tumačenja kompleksnog broja vidimo da se kružnica dobija rotacijom radijus vektora čiji je moduo jednak poluprečniku r, gde promenljiva t predstavlja ugao koji radijus vektor zaklapa sa realnom osom. Za $t = 0$, ugao je nula i $z = r$, dakle, z je realan broj. Kada je $t = \pi/2$

$$z = re^{i\frac{\pi}{2}} = r\left[\cos\left(\frac{\pi}{2}\right) + i\sin\left(\frac{\pi}{2}\right)\right] = ir$$

z je imaginarni broj. Na sličan način može da se nađe da je $z = -r$ za $t = \pi$, odnosno $z = -ir$ za $t = 3\pi/2$. Dakle, množenje imaginarnom jedinicom „i" geometrijski predstavlja rotaciju za $\pi/2$ radijana.

D-8. 2. 2 Parnost funkcije

Parnost funkcije izražava njenu simetriju u odnosu na koordinatni početak. Parna funkcija je (ogledalski) simetrična u odnosu na vertikalnu osu:

$$p(x) = p(-x) \qquad \text{(D-8.2.1)}$$

i zbog toga je njen integral u simetričnom području ($-a$, $+a$) dvostruko veći od integrala na polovini tog područja (0, $+a$):

$$\int_{-a}^{+a} p(x)dx = 2\int_{0}^{+a} p(x)dx. \qquad \text{(D-8.2.2)}$$

Parne funkcije su $\cos x$, $\sin^2 x$, x^2, $\operatorname{sinc} x$, itd.

Neparna funkcija je antisimetrična, tj. njena leva polovina jednaka je desnoj sa promenjenim znakom:

$$n(x) = -n(-x) \qquad \text{(D-8.2.3)}$$

i zbog toga je njen integral u simetričnom području jednak nuli:

$$\int_{-a}^{+a} n(x)dx = 0 . \qquad \text{(D-8.2.4)}$$

Očigledno $n(0) = 0$, tj., neparna funkcija mora da prolazi kroz koordinatni početak, dok parna funkcija može, ali ne mora. Neparne funkcije su sin x, tg x, x, x^3, itd.

Funkcija koja nema simetriju, može da se predstavi kao kombinacija njene parne p_f i neparne n_f komponente:

$$f(x) = p_f(x) + n_f(x)$$

pri čemu je:

$$p_f(x) = \frac{1}{2}[f(x) + f(-x)]$$

$$n_f(x) = \frac{1}{2}[f(x) - f(-x)]\,. \qquad \text{(D-8.2.5)}$$

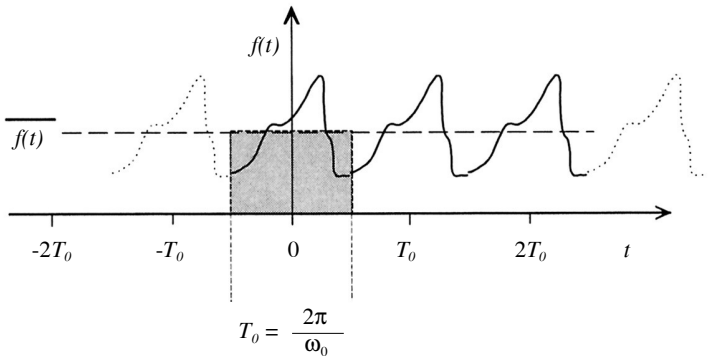
Slično kao kod pozitivnih i negativnih brojeva važi:

$$\begin{aligned} p_1(x)p_2(x) &= p(x) \\ n_1(x)n_2(x) &= p(x) \\ p_1(x)n_2(x) &= n(x)\,. \end{aligned} \qquad \text{(D-8.2.6)}$$

Prepoznavanje parnosti i razlaganje funkcije na parni i neparni deo vrlo je pogodno pri integraljenju u simetričnom području jer za neparne funkcije integral može da se odredi i bez izračunavanja.

D-8.2.3 Periodične funkcije

Periodična funkcija $f(t)$ ponavlja se sa periodom T_0 (odnosno frekvencijom $\omega_0 = 2\pi/T_0$ u radijanima po jedinici vremena), Slika D-8.2.2.



Slika D-8.2.2 Periodična funkcija i njena srednja vrednost.

Srednju vrednost funkcije $\bar{f}$ (t) nalazimo integraljenjem unutar jednog perioda:

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{T_0}\int_{-T_0/2}^{T_0/2} f(t)dt = \frac{\omega_0}{2\pi}\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} f(t)dt\,. \qquad \text{(D-8.2.7)}$$

Srednja vrednost geometrijski predstavlja visinu pravougaonika čija je površina jednaka površini krive u istom području. Srednja vrednost neparne funkcije jednaka je nuli. Međutim, srednja vrednost harmonijskih funkcija (sin *kx*, cos *kx,* e^{ikx}, $k = \pm1, \pm2,...$) u celom broju perioda jednaka je nuli bez obzira na parnost:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \sin(k\omega_0 t)\,dt = 0, \quad \int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \cos(k\omega_0 t)\,dt = 0, \quad \int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} e^{ik\omega_0 t}\,dt = 0. \tag{D-8.2.8}$$

D-8.2.4 Nekoliko korisnih integrala

Jednačine (D-8.2.8) ne važe za $k = 0$ jer tada funkcije nisu oscilatorne. Zapravo, (D-8.2.8) uvek važi samo za sinusnu funkciju. Za kosinusnu i eksponencijalnu funkciju (koje za k=0 imaju vrednost jednaku jedinici) integral se lako nalazi, recimo za $k = m - n$:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \cos[(m-n)\omega_0 t]dt = \int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} e^{i(m-n)\omega_0 t}dt = \begin{cases} 0 & \text{za } m \neq n \\ \dfrac{2\pi}{\omega_0} & \text{za } m = n \end{cases} \tag{D-8.2.9}$$

Drugi korisni integral je:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t)\sin(n\omega_0 t)dt = \begin{cases} 0 & \text{za } m \neq n \\ \dfrac{\pi}{\omega_0} & \text{za } m=n \end{cases} \tag{D-8.2.10}$$

$m,n = \pm1, \pm2,...$

Za $m \neq n$ integral je nula jer je podintegralna funkcija oscilatorna sa celim brojem oscilacija unutar područja u kojem se integrali. Za $m = n$ dobija se funkcija $\sin^2 x$ koja je uvek pozitivna, dakle ima integral veći od nule. Integral funkcije $\sin^2 x$ ne zavisi od frekvencije, već samo od granica integraljenja. Slično tome:

$$\int_{+\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \cos(m\omega_0 t)\cos(n\omega_0 t)dt = \begin{cases} 0 & \text{za } m \neq n \\ \dfrac{\pi}{\omega_0} & \text{za } m = n \neq 0 \\ \dfrac{2\pi}{\omega_0} & \text{za } m = n = 0 \end{cases} \tag{D-8.2.11}$$

$m,n = 0, \pm1, \pm2,...$

S obzirom na to da je proizvod sinusa i kosinusa neparna funkcija (bez obzira na njihove frekvencije), zaključujemo da je:

$$\int_{+\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t)\cos(n\omega_0 t)dt = 0 \qquad \text{(D-8.2.12)}$$

$$m,n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

D-8.2.5 Nekoliko korisnih funkcija

Pravougaona funkcija $\Pi_a(x)$, Slika D-8.2.3a, može da se definiše na sledeći način:

$$\Pi_a(x) = \begin{cases} 0 \text{ za } -\infty < x < -\dfrac{a}{2} \\ 1 \text{ za } -\dfrac{a}{2} < x < +\dfrac{a}{2} \\ 0 \text{ za } \dfrac{a}{2} < x < \infty. \end{cases}$$

Koristi se za opisivanje veličina koje imaju vrednosti samo u ograničenoj oblasti. Važna, očigledna, veza je:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Pi_a(x) f(x)dx = \int_{-a/2}^{+a/2} f(x)dx. \qquad \text{(D-8.2.13)}$$

Dirakova δ-funkcija, Slika D-8.2.3b, može grubo da se shvati kao funkcija koja je svuda jednaka nuli osim za $x = 0$ kada ima beskonačnu vrednost, pri čemu važi:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } x \neq 0 \\ \infty & \text{za } x = 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1. \qquad \text{(D-8.2.14)}$$

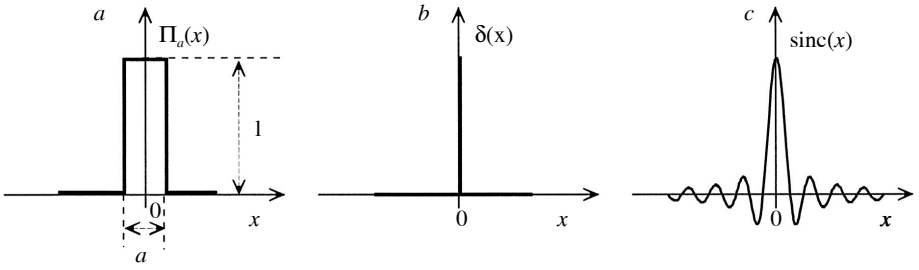
Isto:

$$\delta(x-a) = \begin{cases} 0 & \text{za } x \neq a \\ \infty & \text{za } x = a \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) f(x)dx = f(a). \qquad \text{(D-8.2.15)}$$

Funkcija može da se opiše kao granični slučaj nekih uobičajenih funkcija. Na primer, može da se predstavi kao pravougaona funkcija sa beskonačno malom širinom i beskonačno velikom amplitudom:

$$\delta(x) = \lim_{a \to 0} \frac{\Pi_a(x)}{a}. \qquad \text{(D-8.2.16a)}$$



Slika D-8.2.3 Tri korisne funkcije: a) pravougaona funkcija; b) Dirakova delta funkcija, i c) sink funkcija.

Slično:

$$\delta(x) = \lim_{a \to \infty} \sqrt{\frac{a}{\pi}}\, e^{-ax^2} \qquad \text{(D-8.2.16b)}$$

$$= \lim_{a \to \infty} \frac{a}{2}\, e^{-a|x|} \qquad \text{(D-8.2.16c)}$$

$$= \lim_{a \to \infty} \frac{a}{\pi(a^2 + x^2)} \qquad \text{(D-8.2.16d)}$$

$$= \lim_{a \to \infty} \frac{\sin ax}{\pi x} \qquad \text{(D-8.2.16e)}$$

$$= \lim_{a \to \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-a}^{+a} e^{\pm ixy} dy. \qquad \text{(D-8.2.16f)}$$

Izraz (D-8.2.16e) zaslužuje komentar. Mada vrednost funkcije teži beskonačnosti za $x = 0$ i $a \to \infty$, a njena površina ostaje konstantna i jednaka jedinici, nije sasvim tačno da je njena vrednost jednaka nuli za $x \neq 0$. Međutim, kada $a \to \infty$ vrednost funkcije duž x-ose osciluje sve brže tako da srednja vrednost na proizvoljno malom odsečku, koji ne uključuje nulu, teži nuli. U većini slučajeva to je dovoljno za odgovarajući opis delta funkcije. Integral (D-8.2.16f) isto je što i (D-8.2.16e). Međutim, kao što će se ubrzo videti, on je pogodan za pojednostavljivanje integrala. Delta funkcija je pogodna za opisivanje pojava koje su ograničene u prostoru ili u vremenu, na primer, za opisivanje čestice beskonačno malih dimenzija.

Sink $(\sin x)/x$, Slika D-8.2.3c, ima obvojnicu hiperbole i nule kao i sinusna funkcija:

$$\sin c\, x = \frac{\sin x}{x};\ \text{sinc}\, 0 = 1;\ \text{sinc}\, k\pi = 0;\ k = \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad \text{(D-8.2.17)}$$

Ponekad se definiše i kao $\sin(\pi x)/(\pi x)$. Često se javlja u fizici kod opisivanja pojava vezanih za talasno kretanje, na primer, difrakcije.

D-8.2.6 Furijeovi redovi

Svaka periodična funkcija *F(t)* sa periodom T_0 (odnosno frekvencijom $\omega_0 = 2\pi/T_0$ u radijanima po jedinici vremena), Slika D-8.2.2, može da se predstavi beskonačnim zbirom harmonijskih funkcija čija je frekvencija celobrojni umnožak osnovne frekvencije ω_0:

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(n\omega_0 t) + b_n \sin(n\omega_0 t)] \qquad \text{(D-8.2.18a)}$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{+in\omega_0 t} . \qquad \text{(D-8.2.18b)}$$

Koeficijenti a_n, b_n, g_n predstavljaju nepoznate amplitude. Glavni problem harmonijske analize svodi se na pronalaženje ovih koeficijenata.

Koeficijenti se dobijaju pomoću sledećih jednačina:

$$a_n = \frac{2}{T_0}\int_{-T_0/2}^{+T_0/2} f(t)\cos(n\omega_0 t)dt = \frac{2}{T_0}\int_{0}^{+T_0/2} [f(t)+f(-t)]\cos(n\omega_0 t)dt \qquad \text{(D-8.2.19)}$$

$$b_n = \frac{2}{T_0}\int_{-T_0/2}^{+T_0/2} f(t)\sin(n\omega_0 t)dt = \frac{2}{T_0}\int_{0}^{+T_0/2} [f(t)-f(-t)]\sin(n\omega_0 t)dt \qquad \text{(D-8.2.20)}$$

$$n = 0, 1, 2, ...$$

Važno je da uočimo da se izrazima na levoj strani integrali unutar jednog perioda T_0, a u izrazima na desnoj strani unutar polovine perioda. Izrazi na desnoj strani napisani su po ugledu na (D-8.2.5), da bismo ukazali na vrlo važnu činjenicu da za neparnu funkciju koeficijenti a_n iščezavaju [jer je za neparnu funkciju $f(t) + f(-t) = 0$, (D-8.2.3)], a za parnu da iščezavaju koeficijenti b_n [za parnu funkciju je $f(t) - f(-t) = 0$, (D-8.2.1)]. U eksponencijalnom obliku koeficijenti se nalaze iz izraza:

$$g_n = \frac{1}{T_0}\int_{-T_0/2}^{T_0/2} f(t)e^{-in\omega_0 t}dt = \frac{\omega_0}{2\pi}\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} f(t)e^{-in\omega_0 t}\,dt \qquad \text{(D-8.2.21)}$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$$

pri čemu je veza između koeficijenata g_n, a_n i b_n:

$$g_n = \begin{cases} \frac{1}{2}(a_n - ib_n) & \text{za } n > 0 \\ a_o & \text{za } n = 0 \\ \frac{1}{2}(a_n + ib_n) & \text{za } n < 0 \end{cases} \qquad \text{(D-8.2.22)}$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$$

Veza (D-8.2.21) se lako proverava. Polazeći od eksponencijalnog oblika Furijeovog reda, množenjem izraza (D-8.2.18b) sa $e^{m\omega_0 t}$ i integraljenjem, **unutar jednog perioda** ($T_0 = 2\pi/\omega_0$):

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} f(t)e^{-im\omega_0 t}\,dt = \int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0}\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{+i(n-m)\omega_0 t}\right)dt$$

a zatim zamenom redosleda integraljenja i sabiranja:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} f(t)e^{-im\omega_0 t}\,dt = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\left(\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} g_n e^{+i(n-m)\omega_0 t}dt\right)$$

uzimajući u obzir jednačinu (D-8.2.9) (koja pokazuje da integrali za $m \neq n$ iščezavaju), nalazimo:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega} f(t)e^{-im\omega_0 t}dt = g_m\frac{2\pi}{\omega_0}$$

odakle se preuređivanjem dobija izraz (D-8.2.21). Slično ovome, za Furijeov red izražen preko sinusnih i kosinusnih članova, množenjem izraza (D-8.2.18a) sa cos $m\omega_o t$ i integraljenjem unutar jednog perioda, nalazimo:

$$\begin{aligned}\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega} f(t)\cos(m\omega_0 t)dt = &+\frac{a_0}{2}\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0}\cos(m\omega_0 t)dt\\ &+\sum_{n=1}^{\infty} a_n\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0}\cos(m\omega_0 t)\cos(n\omega_0 t)dt\\ &+\sum_{n=1}^{\infty} b_n\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0}\cos(m\omega_0 t)\sin(n\omega_0 t)dt\,.\end{aligned} \qquad \text{(D-8.2.23)}$$

Prvi član s desne strane predstavlja srednju vrednost kosinusne funkcije koja je jednaka nuli za svako m osim za $m = 0$, kada iznosi $a_0\pi/2$, jednačina (D-8.2.7). Treći član iščezava prema (D-8.2.4), jer je podintegralna funkcija neparna, jednačina (D-8.2.6). Najzad, drugi član ima vrednost različitu od nule samo za $m = n$, $a_0\pi/2$, prema (D-8.2.11). Dakle (D-8.2.23) se svodi na sledeći izraz:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0}\cos(m\omega_0 t)\,dt = a_m\frac{\pi}{\omega_0}$$

$$m = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$$

iz kojeg prostim preuređivanjem nalazimo (D-8.2.19). Slično tome, za sinusne članove, polazeći od (D-8.2.18a) imamo:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} f(t)\sin(m\omega_0 t)\,dt = +\,a_m \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t)\,dt$$

$$+\sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t)\cos(n\omega_0 t)\,dt$$

$$+\sum_{n=1}^{\infty} b_n \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t)\sin(n\omega_0 t)\,dt\ .$$

Prva dva izraza jednaka su nuli prema (D-8.2.4) (podintegralne funkcije neparne), dok iz poslednjeg izraza, saglasno jednačini (D-8.2.10), preostaje samo član za $m = n$, kada integral iznosi π/ω. Najzad, preuređivanjem dobijamo izraz (D-8.2.20).

Da bi izvedene jednačine važile, funkcija *f(t)* mora:

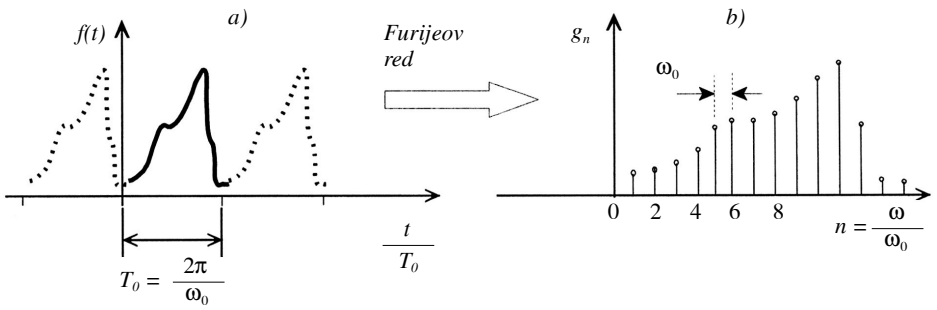
da se proteže od $t = -\infty$ do $t = +\infty$;

da bude periodično sa periodom T_0;

da bude jednoznačna;

i da bude konačna u celom intervalu definisanosti.

Pri tome, funkcija može da bude kompleksna, a sme da ima i tačke prekida. Dakle, svaka periodična funkcija koja ispunjava pomenute uslove, može da se izrazi preko beskonačnog zbira harmonijskih funkcija sa frekvencijama koje su celobrojni umnošci osnovne frekvencije ω_0, Slika D-8.2.4. Pošto između prvobitne funkcije *f(t)* i njenih Furijeovih koeficijenata postoji jednoznačna veza, jednačine (D-8.2.18), za potpuni opis sasvim je svejedno da li je poznata funkcija ili njeni Furijeovi koeficijenti. U koeficijentima su sadržani svi podaci o prvobitnoj funkciji, samo što su upakovani na malo drukčiji način, Slika D-8.2.4b. Na primer, ako se funkcijom *f(t)* izražava promena amplitude tokom vremena, tada Furijeovi koeficijenti daju intenzitete oscilacija na odgovarajućim frekvencijama. Izbor domena u kome se pojava posmatra [u vremenskom domenu preko funkcije *f(t)* ili u frekventnom domenu preko Furijeovih koeficijenata] zavisi samo od pogodnosti.

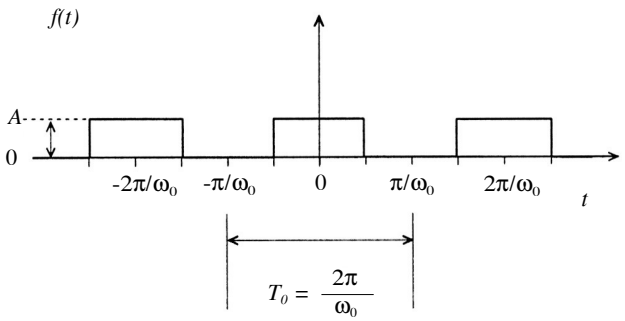


Slika D-8.2.4 Periodična pojava sa periodom T_0, na ekvivalentan način može da se opiše: a) preko promene amplitude oscilacija sa vremenom; ili b) preko amplituda na različitim frekvencijama. Pri tome se veza između amplitude *f(t)* i koeficijenata g_n, dobija iz razvoja funkcije u Furijeov red.

Primer: Posmatrajmo periodični niz pravougaonih pulseva, Slika D-8.2.5, koji može da se predstavi izrazom:

$$f(t)= \begin{cases} A \text{ za } |t| \le \left(k \pm \frac{1}{4}\right) T_0 \\ 0 \text{ za } |t| \le \left[\frac{1}{2}(k+1) \pm \frac{1}{4}\right] T_0 \end{cases} . \qquad \text{(D-8.2.24)}$$

Ako uočimo da je funkcija parna, nema potrebe da računamo koeficijente b_n pošto su svi jednaki nuli.



Slika D-8.2.5 Periodični niz pravougaonih impulsa prema (D-8.2.24).

Potražimo li koeficijente a_n, prema izrazu (D-8.2.19), uz zamenu granice integraljenja prema izrazu (D-8.2.13), imamo:

$$a_n = \frac{\omega_0}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2\omega_0}}^{+\frac{\pi}{2\omega_0}} A\cos(n\omega_0 t)\,dt$$

odakle neposrednim integraljenjem nalazimo:

$$a_n = A\frac{\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)}{\frac{n\pi}{2}} = A\,\mathrm{sin}c\left(\frac{n\pi}{2}\right) \qquad \text{(D-8.2.25)}$$

$$n = 0, 1, 2, ...$$

Dakle:

$$f(t) = \frac{A}{2} + A\sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{sin}c\left(\frac{n\pi}{2}\right)\cos(n\omega_0 t)$$

(D-8.2.26)

$$f(t) = \frac{A}{2} + \frac{2A}{\pi}\left[\cos\omega_0 t - \frac{\cos 3\omega_0 t}{3} + \frac{\cos 5\omega_0 t}{5} - \ldots\right].$$

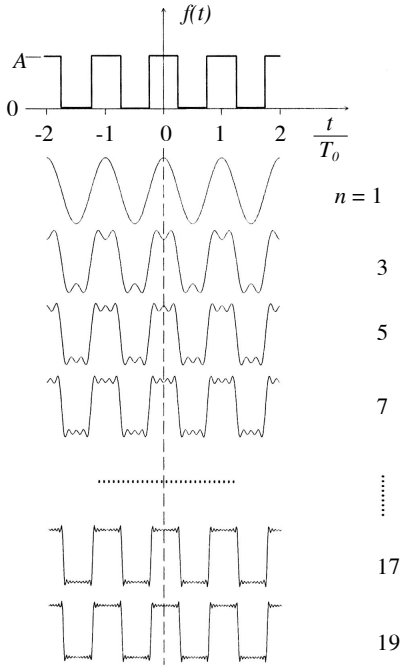
Saglasno izrazu (D-8.2.22):

$$g_n = \frac{A}{n\pi}\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \text{ i } g_0 = \frac{A}{2}$$

što zamenom prema (D-8.2.18b) daje:

$$f(t) = \frac{A}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin c\left(\frac{n\pi}{2}\right) e^{in\omega_0 t}.$$

Slika D-8.2.6 pokazuje funkciju $f(t)$ prema izrazu (D-8.2.24) i njeno razvijanje u Furijeov red prema (D-8.2.26). Očigledno je da se Furijeov red približava funkciji sa porastom broja članova.

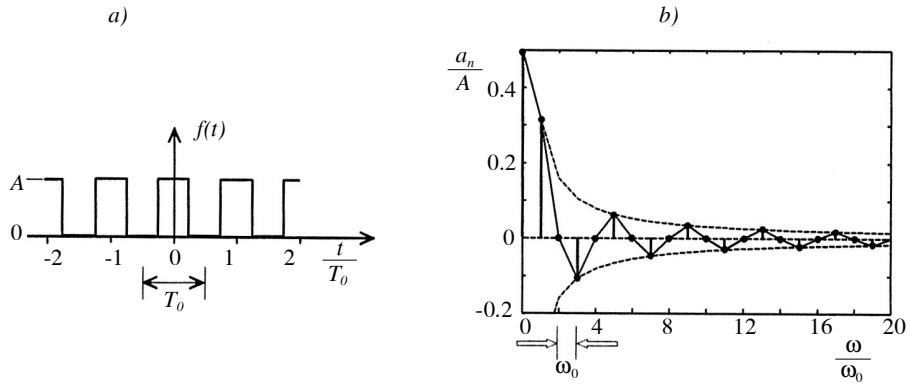


Slika D-8.2.6 Periodična funkcija i njeno razvijanje u Furijeov red. Brojevi s desne strane pokazuju broj članova Furijeovog reda.

Drugi, često mnogo pogodniji način da se ista pojava opiše, jeste da se umesto funkcije posmatraju njeni Furijeovi koeficijenti. Za određeni primer Furijeovi koeficijenti su dati sink funkcijom:

(D-8.2.24) (D-8.2.25)
$$f(t) = \begin{cases} A \text{ za } |t| \le \left(k \pm \frac{1}{4}\right)T_0 & a_n = A\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \\ 0 \text{ za } |t| \le \left[\frac{1}{2}(k+1) \pm \frac{1}{4}\right]T_0 & b_n = 0. \end{cases}$$

Slika D-8.2.7 pokazuje vezu između prvobitne funkcije (D-8.2.24) i njenih Furijeovih koeficijenata (D-8.2.25). Kao što u vremenskom domenu t, pojavu opisuje amplituda oscilovanja $f(t)$, tako i Furijeovi koeficijent a_n opisuju istu pojavu u frekventnom domenu ω preko intenziteta na pojedinim harmonicima, $n\omega_0$. Drugim rečima, Furijeovi koeficijenti predstavljaju spektar periodične funkcije.



Slika D-8.2.7 Periodična funkcija i njen spektar: a) prema jednačini (D-8.2.24); b) prema jednačini (D-8.2.25).

Treba da se uoči da između osnovnih jedinica u vremenskom domenu T_0 i u frekventnom domenu ω_0, postoji veza $\omega_0 T_0 = 2\pi$.

D-8.2.7 Furijeova transformacija

Na potpuno ekvivalentan način kao kod razvijanja periodične funkcije u Furijeov red, Furijeova transformacija može da se smatra razvijanjem aperiodične funkcije u njen spektar. Jedina, ali vrlo bitna, razlika jeste u tome što periodična funkcija ima diskretan spektar, dok je spektar aperiodične funkcije neprekidan. To je jasno iz definicije perioda i frekvencije. Periodična funkcija sa periodom T_0 ima osnovnu frekvenciju ω_0 ($\omega_0 = 2\pi/T_0$) i harmonike u Furijeovom razvoju sa frekvencijama $n\omega$, dok kod aperiodične funkcije period neograničeno raste, $T_0 \to \infty$, i zbog toga osnovna frekvencija teži nuli. $\omega_0 \to 0$! Isto tako i razmak između harmonika teži nuli, dakle, spektar postaje neprekidan. Između Furijeovih redova i Furijeove transformacije postoji potpuna ekvivalencija:

Periodična funkcija	Furijeov red	Diskretni spektar
$f(t) = f(t + T_0)$	$\Rightarrow$	$n\omega_0$, a_n
Aperiodična funkcija	Furijeova transformacija	Neprekidni spektar
$f(t) = f(t + T_0),\ T_0 \to \infty$	$\Rightarrow$	$n\omega_0 \to \omega$, $a_n \to G(\omega)$

$$\text{Furijeov red} \Rightarrow \left[\begin{array}{c} T_0 \to \infty \\ \omega_0 \to 0 \\ n\omega_0 \to \omega \\ \sum_{-\infty}^{\infty} \to \int_{-\infty}^{\infty} \\ \int_{-\frac{T_0}{2}}^{\frac{T_0}{2}} \to \int_{-\infty}^{\infty} \end{array}\right] \Rightarrow \text{Furijeova transformacija}.$$

Furijeova transformacija lako može da se izvede preko Furijeovih redova. Kao što kod periodične funkcije koeficijenti a_n, b_n ili g_n predstavljaju amplitude oscilacija na diskretnim frekvencijama $n\omega_0$, tako funkcije $A(\omega)$, $B(\omega)$ ili $G(\omega)$ kod aperiodične funkcije predstavljaju amplitude oscilacije na frekvencijama ω iz neprekidnog spektra. Tačnije, funkcije $A(\omega)$, $B(\omega)$ ili $G(\omega)$, predstavljaju amplitude oscilacija u jediničnom frekventnom opsegu u okolini frekvencije ω. Slično tome, koeficijenti a_n, b_n ili g_n predstavljaju amplitude oscilovanja po jediničnom frekventnom opsegu u okolini frekvencije $n\omega_0$. Pošto je u diskretnom spektru jedinični opseg jednak osnovnoj frekvenciji, to važi:

$$\frac{A(\omega)}{d\omega} = \frac{a_n}{\Delta\omega}$$

$$\frac{A(\omega)}{1} = \frac{a_n}{\omega_0}$$

odnosno:

$$A(\omega) = \frac{a_n}{\omega_0}. \qquad \text{(D-8.2.27)}$$

Polazeći od Furijeovih koeficijenata (D-8.2.19), a koristeći zamenu:

$$\int_{-\frac{\pi}{\omega_0}}^{\frac{\pi}{\omega_0}} \to \int_{-\infty}^{\infty}$$

i:

$$n\omega_0 = \omega$$

nalazimo:

$$A(\omega) = \frac{a_n}{\omega_0} = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\cos(\omega t)\,dt.$$

Na sličan način:

$$B(\omega)= \frac{b_n}{\omega_0} = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\sin(\omega t)dt\,.$$

Dakle, Furijeov red periodične funkcije $f(t)$:

(D-8.2.18a) $$f(t) = \sum_{n=0}^{\infty}[a_n\cos(n\omega_0 t) + b_n\sin(n\omega_0 t)]$$

kada funkcija postaje aperiodična, prelazi u Furijeovu transformaciju:

$$f(t) = \int_0^{\infty}[A(\omega)\cos\omega t + B(\omega)\sin\omega t]\,d\omega. \qquad \text{(D-8.2.28)}$$

Veličina predstavljena u vremenskom domenu funkcijom $f(t)$ može da se *ekvivalentno* predstavi u frekventnom domenu koeficijentima $A(\omega)$ i $B(\omega)$; $f(t)$ i koeficijenti $A(\omega)$ i $B(\omega)$ povezani su Furijeovom transformacijom, kao što su povezane periodične funkcije i njihovi Furijeovi koeficijenti.

Slično Furijeovim redovima, Furijeova transformacija može da se izrazi na nekoliko različitih (ekvivalentnih) načina:

$$f(t) = \int_0^{\infty}[A(\omega)\cos\omega t + B(\omega)\sin(\omega t)]\,d\omega \qquad \text{(D-8.2.29)}$$

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} E(\omega)e^{+i\omega t}d\omega \qquad \text{(D-8.2.30)}$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{+i\omega t}d\omega \qquad \text{(D-8.2.31)}$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(v)e^{+i2\pi vt}dv \qquad \text{(D-8.2.32)}$$

$$(\omega = 2\pi v)$$

gde su funkcije $A(\omega)$, $B(\omega)$, $E(\omega)$, $F(\omega)$, $G(\omega/2\pi)$ međusobno povezane relacijama:

$$A(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\cos(\omega t)dt = \frac{1}{2\pi}[F(\omega) + F(-\omega)] \qquad \text{(D-8.2.33)}$$

$$B(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\sin(\omega t)dt = \frac{i}{2\pi}[F(\omega) - F(-\omega)] \qquad \text{(D-8.2.34)}$$

$$E(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t}\,dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}G\left(\frac{\omega}{2\pi}\right) \qquad \text{(D-8.2.35)}$$

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t}\,dt = \pi[A(\omega) - iB(\omega)] \quad \omega > 0 \qquad \text{(D-8.2.36)}$$

$$= \pi[A(|\omega|) + iB(|\omega|)] \quad \omega < 0\,.$$

Na potpuno isti način kao kod Furijeovih redova, izraz na desnoj strani jednačina (D-8.2.33) i (D-8.2.34) pokazuju da je za neparnu funkciju $A(\omega) = 0$, a za parnu funkciju $B(\omega) = 0$.

Ako uporedimo izraz (D-8.2.29) i (D-8.2.35), možemo da uočimo vrlo važnu simetriju:

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} E(\omega)e^{+i\omega t}\,d\omega \qquad \text{(D-8.2.37a)}$$

$$E(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t}\,dt. \qquad \text{(D-8.2.37b)}$$

Funkcije $f(t)$ i $E(\omega)$ slede jedna iz druge na vrlo sličan način, pa može da se kaže da ako je $f(t)$ Furijeova transformacija od $E(\omega)$, tada je $E(\omega)$ inverzna Furijeova transformacija funkcije $f(t)$. Ukratko, $f(t)$ i $E(\omega)$ formiraju Furijeov transformacioni par. Jedina razlika u izrazima (D-8.2.37) ogleda se u promeni znaka u eksponencijalnom članu. Pri tome, sasvim je svejedno koji se od izraza smatra neposrednom transformacijom, pa još konciznije može da se napiše:

$$f(t) = \mathrm{FT}\{E(\omega)\}$$
$$E(\omega) = \mathrm{FT}^{-1}\{f(t)\}$$
$$f(t) \overset{FT}{\Leftrightarrow} E(\omega).$$

Veze (D-8.2.37) lako možemo da dokažemo:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega' t}dt = \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega)\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{+i(\omega-\omega')t}dt\right]d\omega \qquad \text{(D-8.2.38a)}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega)\delta(\omega - \omega')d\omega \qquad \text{(D-8.2.38b)}$$

$$= E(\omega'). \qquad \text{(D-8.2.38c)}$$

Izraz (D-8.2.38a) smo dobili množenjem obe strane jednačine (D-8.2.37a) sa $e^{-i\omega t}/\sqrt{(2\pi)}$ i integraljenjem po t; izraz u uglastoj zagradi na desnoj strani (D-8.2.38a) predstavlja integralni oblik delta funkcije (D-8.2.16f), čijom zamenom dobijamo (D-8.2.38b). Na kraju, integra-

ljenjem, prema (D-8.2.15), nalazimo (D-8.2.38c). Zamenom promenljivih, $\omega' \to \omega$, nalazimo da smo, polazeći od (D-8.2.38a), poznatim transformacijama stigli do (D-8.2.38b), dakle, dva izraza su ekvivalentna.

Primer: Potražimo Furijeovu tranformaciju pravougaone impulsne funkcije, Slika D-8.2.8:

$$f(t) = \begin{cases} A \text{ za } |t| \le L \\ 0 \text{ za } |t| > L \,. \end{cases} \qquad \text{(D-8.2.39)}$$

Pošto je funkcija parna $B(\omega) = 0$, a $A(\omega)$, zamenom u izrazu (D-8.2.33) nalazimo:

$$A(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\cos\omega t dt = \frac{1}{\pi}\int_{-L}^{+L} A\cos\omega t dt = \frac{A}{\pi\omega}\int_{-L}^{+L}\cos\omega t d(\omega t)$$

odakle neposredno dobijamo:

$$A(\omega) = \frac{A}{\pi}\frac{1}{\omega}\sin(\omega t)\Big|_{t=-L}^{+L} = \frac{A}{\pi}\omega[\sin(\omega L) - \sin(\omega L)] \qquad \text{(D-8.2.40a)}$$

$$= \frac{2A}{\pi\omega}\sin(\omega L) = \frac{2AL}{\pi}\ \mathrm{sinc}(\omega L)$$

ili s obzirom na (8.2.36):

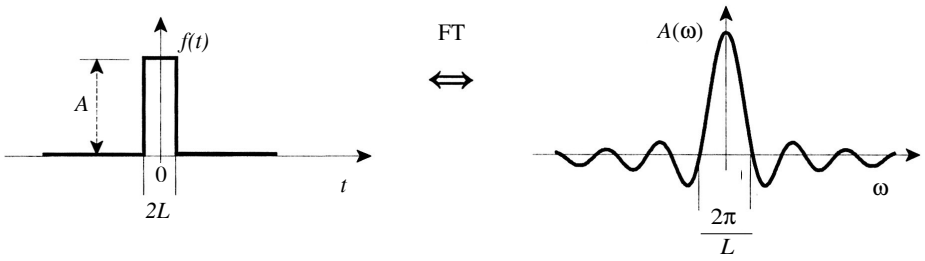
$$F(\omega) = 2AL\ \mathrm{sinc}(\omega L). \qquad \text{(D-8.2.40b)}$$

Dakle, Furijeova transformacija pravougaone impulsne funkcije je sink funkcija, kao što je šematski prikazano na Slici D-8.2.8:

$$f(t) = \Pi_{2L}(x) = \begin{cases} A \text{ za } |t| \le L \\ 0 \text{ za } |t| > L \end{cases} \qquad A(\omega) = 2A\frac{\sin(L\omega)}{\omega}.$$

Na Slici D-8.2.9 prikazana je Furijeova transformacija na primeru pravougaone i sink funkcije. Furijeova transformacija funkcije može da se shvati kao zbir (predstavljen integralom) oscilacija (koje su predstavljene sinusnim, kosinusnim ili eksponencijalnim delom podintegralne funkcije) s odgovarajućim težinama (koje su predstavljene funkcijom koja se transformiše). Dakle, za kosinusnu transformaciju funkcije $E(\omega)$, serija kosinusnih članova $\cos(\omega t)$ sa različitim frekvencijama ω množi se odgovarajućim koeficijentima $E(\omega)$, $E(\omega)\cos(\omega t)$ i sabira se (integrali), što daje funkciju *f(t)*, jednačina (D-8.2.37a). Ako je $E(\omega) = \Pi_L(\omega)$, Slika D-8.2.9a, tada zbir oscilacija $\Pi(\omega)\cos(\omega t)$ daje funkciju sinc (*t*), Slika D-8.2.9a (gore). Važi i obrnuto, ako je $E(\omega) = \mathrm{sinc}(\omega)$, Slika D-8.2.9c, tada zbir oscilacija $\mathrm{sinc}(\omega)\cos(\omega t)$ daje funkciju Π (*t*), Slika D-8.2.9c (gore).

Najvažnija osobina Furijeove transformacije jeste da fizičku pojavu opisanu u jednom skupu koordinata *r* (vreme, prostor, energija, impuls, itd.) može da opiše na odgovarajći način u drugom skupu koordinata *s*, pri čemu su kordinate *r* i *s* povezane jednačinom:



Slika D-8.2.8 Pravougaona impulsna funkcija (D-8.2.39) i njena Furijeova transformacija (D-8.2.40). Zbog reverzibilnosti, može da se smatra i obrnuto, da je pravougaona impulsna funkcija Furijeova transformacija sink funkcije. Zapravo, pravougaona ipmulsna funkcija i sink funkcija obrazuju Furijeov transformacioni par. Treba da se uoči to da je proizvod iz širina (ma kako one bile definisane) transformacionog para konstanta, u ovom slučaju $2L \times 2\pi/L = 4\pi$. Dakle, ako se jedna funkcija širi, druga se sužava.

$$r_0 s_0 = const. \tag{D-8.2.41}$$

gde su indeksom nula označeni odgovarajući jedinični vektori. Na primer, ako se oscilovanje sistema u vremenskom domenu t predstavlja funkcijom $f(t)$, tada se iste oscilacije u frekventnom domenu ω, opisuju funkcijom $E(\omega)$, pri čemu između funkcija važe veze (D-8.2.37), a između koordinata:

$$\omega_0 t_0 = 2\pi \tag{D-8.2.42}$$

gde je ω_0 jedinična frekvencija, a t_0 jedinični period.

Ako uzmemo u obzir Plankovu jednačinu za energiju oscilatora $(\Delta\varepsilon_0 = \hbar\omega_0)$ množenjem izraza (D8.2.42) Plankovom konstantom $\hbar$ nalazimo da je:

$$(\Delta\varepsilon_0) t_0 = h. \tag{D-8.2.43}$$

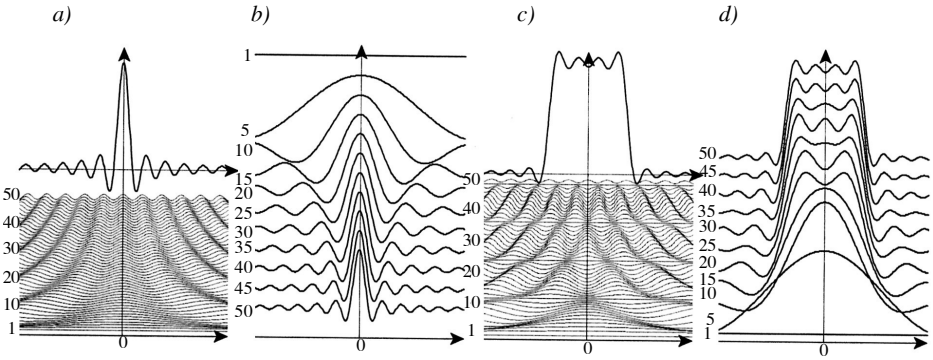
Kao što se za opis oscilatornog kretanja koriste vreme i fekvencija, tako se za prostiranje talasa u prostoru koriste talasna dužina λ i talasni vektor k. Talasne dužine mere se i izražavaju u jedinicama dužine, dok se talasni vektor izražava u recipročnim jedinicama dužine. Talasna dužina je parametar stvarnog prostora, a talasni vektor recipročnog prostora. Prelaz iz opisa preko talasne dužine (stvarnog prostora) u opis preko talasnih vektora (recipročni prostor) izvodi se Furijeovom transformacijom. Na potpuno isti način kao kod jednačine (D-8.2.42), imamo:

$$x_0 k_0 = 2\pi \tag{D-8.2.44}$$

odnosno, s obzirom na to da je $k = 2\pi/\lambda$:

$$x_0 \frac{1}{\lambda_0} = 1. \tag{D-8.2.45}$$

Imajući na umu De Broljijevu jednačinu koja povezuje impuls čestice p sa njenom talasnom dužinom, λ, $p = h/\lambda$, množenjem izraza (D-8.2.45) Plankovom konstantom nalazimo:

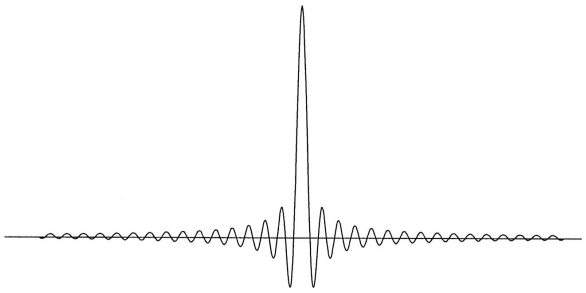


Slika D-8.2.9 Furijeova transformacija može da se shvati kao razlaganje neperiodične funkcije na njen (neprekidan) spektar. U jednačini (D-8.2.37a) integralom je predstavljeno sabiranje komponenata funkcije $E(\omega)$ po neprekidno rastućim ferkvencijama ω. Eksponencijalni član (sinusni ili kosinusni, svejedno je) koji se još naziva i jezgro transformacije, predstavlja oscilacije na datoj ferkvenciji, a funkcija ispred njega predstavlja njihovu amplitudu. Sabiranjem oscilacija na svim frekvencijama s odgovarajućim amplitudama (integraljenjem), dobija se funkcija čiji je spektar $E(\omega)$: a) sabiranjem kosinusnih talasa iste amplitude sa neprekidno rastućom frekvencijom u ograničenom opsegu $(-\omega_1, \omega_1)$, dakle $E(\omega) = \Pi(\omega)$ dobija se sinc funkcija (gore), dakle *f(t) = sinc (t)*; (b) parcijalne sume kosinusnih funkcija. Sa porastom broja članova raste širina Π– funkcije zbog čega opada širina sinc funkcije; c) kao pod a), s tim što su amplitude oscilacija modulisane (pomnožene) sinc funkcijom, dakle, $E(\omega) = \text{sinc}(\omega)$. Zbir oscilacija (gore) konvergira ka Π – funkciji, dakle *f(t) – Π(t)*; d) parcijalne sume funkcija sa slike c). Sa porastom broja članova suma se približava Π-funkciji. Dakle, spektar Π – funkcije je sinc funkcija i obrnuto.

$$x_0 p_0 = h\,. \tag{D-8.2.46}$$

Nije stvar matematike da jediničnim vektorima $\Delta\varepsilon_0$, t_0, x_0, p_0 daje fizičko značenje, ali treba uočiti da se u izrazima (D-8.2.43) i (D-8.2.46) krije Hajzenbergova relacija neodređenosti. Dakle Hajzenbergova relacija neodređenosti odnosi se na fizičke veličine koje se izražavaju u koordinatama čiji odnos može matematički da se izrazi Furijeovom transformacijom.

Kao što smo videli u prethodnom odeljku, kretanje čestice može da se izrazi ravanskim talasom koji nije prostorno organičen. Međutim, u najvećem broju eksperimenata elektroni, protoni, jezgra atoma, itd. mogu da se otkriju u određenom delu prostora. Zbog toga, opisivanje čestice ravnim talasom tipa (8.1.23) nije odgovarajuće. Poput čestice, i talasna funkcija koja česticu opisuje, treba da bude lokalizovana. Lokalizovani talas se konstruiše superpozicijom velikog broja talasa čije se talasne dužine prostiru u izvesnom intervalu u okolini De Broljijeve talasne dužine. Dakle, umesto jednog talasa, česticu predstavljamo skupom talasa – talasnim paketom. Talasni paket formiramo takvim slaganjem De Broljijevih talasa da amplituda rezultujućeg talasa bude zanemarljivo mala svuda osim u delu prostora koji odgovara dimenzijama čestice. Pokazaćemo kako se dobija jednodimenzioni talasni paket. Sabiraćemo talase jednakih amplituda, a sa talasnim vektorima koji se menjaju u uskom opsegu $k - \Delta k \le k \le k + \Delta k$, Slika 8.2.1.



Slika 8.2.1 Čestica predstavljena kao talasni paket.

Ako su talasni brojevi (intenziteti talasnih vektora) komponentnih talasa vrlo bliski, rezultujući talas umesto zbirom možemo da predstavimo integralom:

$$\psi(x,t)= \sum_j \psi_0 e^{i(k_j x - \omega_j t)} \Rightarrow \psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \psi_0 e^{i(kx-\omega t)} dk \ . \tag{8.2.1}$$

Pretpostavljajući da su amplitude pojedinih talasa jednake, ψ_0 možemo kao konstantu da izvičemo ispred integrala. Ugaonu fekvenciju ω, koja je funkcija intenziteta talasnog vektora, razvićemo u Tejlorov red oko vrednosti $k = k_0$ i zadržaćemo samo prvi član razvoja. To je dovoljno dobra aproksimacija ako se uzme u obzir da se talasni vektor menja samo u uskom intervalu oko k_0:

$$\omega = \omega_0 + \omega'(k - k_0) \tag{8.2.2a}$$

gde je ω' prvi izvod frekvencije po vremenu:

$$\omega' = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} \ . \tag{8.2.2b}$$

Zamenom u (8.2.1) sledi:

$$\psi(x,t) = \psi_0 \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i\{kx - [\omega_0 + \omega'(k-k_0)]t\}} dk \tag{8.2.3}$$

a uvođenjem smene $\xi = k - k_0$

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(x-\omega' t)\xi} d\xi = A(x,t) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \tag{8.2.4}$$

gde smo sa *A(x,t)* označili promenljivu amplitudu talasnog paketa:

$$A(x,t) = \psi_0 \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(x-\omega' t)\xi} d\xi . \tag{8.2.5}$$

Podintegralna funkcija, prema Ojlerovoj formuli, može da se razloži na sinusnu i kosinusnu komponentu:

$$e^{i(x-\omega' t)} = \cos[(x-\omega' t)\xi] + i\sin[(x-\omega' t)\xi] .$$

Pošto je sinusna funkcija neparna, njen integral u simetričnom intervalu iščezava (D-8.2.4), pa je dovoljno integraliti realni (kosinusni) deo:

$$A(x,t) = \psi_0 \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \cos(x-\omega' t)\xi d\xi = 2\psi_0 \frac{\sin[(x-\omega' t)\Delta k]}{x-\omega' t} .$$

Dalje, ako pomnožimo i brojilac i imenilac dobijenog izraza sa Δk, dobijamo:

$$A = 2\psi_0 \Delta k \frac{\sin[(x-\omega' t)\Delta k]}{(x-\omega' t)\Delta k}. \tag{8.2.6}$$

Uvođenjem smene:

$$(x-\omega' t)\Delta k = \eta \tag{8.2.7}$$

izraz (8.2.6) postaje:

$$A = 2\psi_0 \Delta k \frac{\sin\eta}{\eta} = \operatorname{sinc}\eta . \tag{8.2.8}$$

Ovu funkciju smo već analizirali u odeljku D-8.2.4. Iako, strogo uzevši, nije potpuno lokalizovana, sink funkcija je dobra aproksimacija talasnog paketa jer se 95% talasnog paketa nalazi unutar opsega definisanog prvim nulama, $-\pi \le \eta \le +\pi$, Slika 8.2.2.

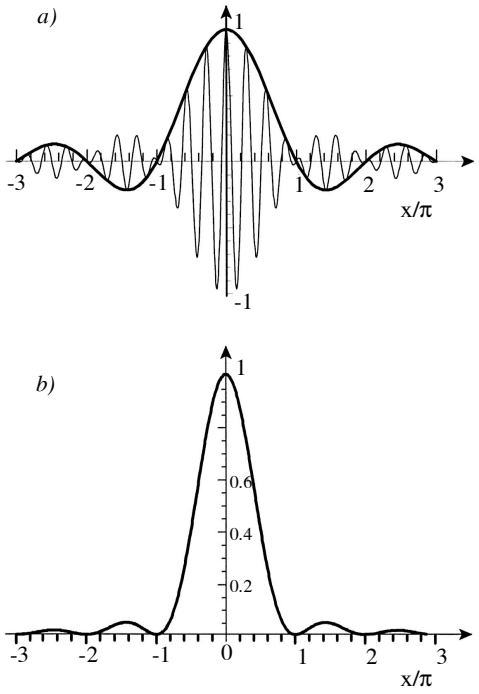
Dakle, talasni paket može da se predstavi amplitudno modulisanim harmonijskim talasom (8.2.4), čiji je realni deo:

$$Re|\psi(x,t)| = 2\psi_0 \Delta k \ \operatorname{sinc}[(x-\omega' t)\Delta k]\cos(k_0 x - \omega_0 t) \tag{8.2.9}$$

a kvadrat:

$$\psi(x,t)\psi(x,t)^* = 4\psi_0^2 \Delta k^2 \operatorname{sinc}^2[(x-\omega' t)\Delta k] . \tag{8.2.9a}$$

U jednačini (8.2.9) možemo da prepoznamo dve komponente talasnog paketa, kosinusnu koja predstavlja noseći talas i sinc komponentu koja pokazuje njegovu modulaciju, Slika 8.2.2a. Kada se kompleksna ψ funkcija digne na kvadrat, brzo oscilujući kosinusni deo se gubi i funkcija postaje jednaka kvadratu ampitude, Slika 8.2.2b.



Slika 8.2.2 Talasni paket: a) realni deo talasne funkcije $\psi(x,t)$, (8.2.9). Deo koji brzo osciluje potiče od komponente cos (kx-ωt) na konstantnom vremenu *t*. Obvojnica predstavlja amplitudu *A* (8.2.6) uz Δk=1. Deo koji brzo osciluje nosi podatke samo o fazi talasa i stoga se prostire faznom brzinom, υ_f. Obvojnica nosi podatke o položaju čestice i kreće se grupnom brzinom, υ_g; b) kvadrat talasnog paketa, $\psi\psi^*$ (8.2.9a) jednak je kvadratu obvojnice i opisuje verovatnoću da se čestica nađe na koordinati *x*. U intervalu $x \in (-\pi,\pi)$ nalazi se preko 95% površine krive.

Pri prostiranju talasnog paketa nije obavezno da se obvojnica kreće istom brzinom kao i sam noseći talas i stoga je potrebno definisati njihove brzine. Fazna brzina se dobija iz jednačine (8.2.9) izjednačavanjem argumenta kosinusne funkcije sa konstantom. Time je definisana tačka na talasu koja ima konstantnu fazu. Brzina kojom se tačka sa proizvoljno odabranom fazom kreće u prostoru predstavlja faznu brzinu. Ako za vrednost konstante izaberemo nulu, tada je cos 0=1 i tada posmatramo brzinu kojom se kreće neki od maksimuma nosećeg talasa:

$$\omega_0 t - k_0 x = const. = 0 \Rightarrow x = \frac{\omega_0}{k_0} t + const'. \tag{8.2.10}$$

Iz dobijenog izraza, brzinu pomeranja ekvifazne ravni, odnosno faznu brzinu υ_f nalazimo preko prvog izvoda koordinate po vremenu:

$$\upsilon_f = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega_0}{k_0}. \tag{8.2.11}$$

Dakle, fazna brzina jednaka je odnosu frekvencije i talasnog broja, kako smo našli i za ravanski talas (D-8.1.2b).

Brzina kojom se kreće obvojnica talasnog paketa naziva se grupna brzina. Dobijamo je iz jednačine (8.2.6), ili (8.2.10) tako što argument obvojnice, sink funkcije, izjednačimo sa nulom, čime definišemo maksimum talasnog paketa:

$$\omega' t - x = 0.$$

Grupnu brzinu nalazimo iz prvog izvoda puta po vremenu:

$$\upsilon_g = \frac{dx}{dt} = \omega' \tag{8.2.12a}$$

a imajući na umu da je ω' prvi izvod frekvencije po talasnom broju (8.2.2b):

$$\upsilon_g = \frac{d\omega}{dk}. \tag{8.2.12}$$

U sredini u kojoj nema disperzije, odnosno kada fazna brzina ne zavisi od k (ili λ), fazna i grupna brzina su međusobno jednake. Zaista, ako u izrazu za grupnu brzinu υ_g, ω zamenimo sa $\upsilon_f \cdot k$, kao što sledi iz jednačine (8.2.11), nalazimo da je grupna brzina υ_g:

$$\upsilon_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}(\upsilon_f k) = \upsilon_f \tag{8.2.13}$$

jer je υ_f konstanta. U slučaju kada fazna brzina zavisi od k, $\upsilon_f = f(k)$, može da se izvede veza između fazne i grupne brzine:

$$\upsilon_g = \frac{d(k\upsilon_f)}{dk} = \upsilon_f + k\frac{d\upsilon_f}{dk} = \upsilon_f + k\frac{d\upsilon_f d\lambda}{d\lambda dk} \tag{8.2.14}$$

ili kada se uzme u obzir jednačina (D-8.1.6):

$$\upsilon_g = \upsilon_f - \frac{2\pi}{k}\frac{d\upsilon_f}{d\lambda} = \upsilon_f - \lambda\frac{d\upsilon_f}{d\lambda}. \tag{8.2.15}$$

Dakle, faznom brzinom se opisuje kretanje nosećeg talasa, a grupnom njegove amplitudne modulacije. Kretanje čestice opisuje se grupnom brzinom υ_g.

Predstavljanje čestice talasnim paketom izgleda vrlo privlačno jer omogućava tumačenje kako njenih „čestičnih" tako, i „talasnih" svojstava. Pokazuje se, međutim, da talasni paket dobro predstavlja svojstva čestice samo u prvoj aproksimaciji. Ako se izvede tačniji račun i u razvoju ω u Tejlorov red po k zadrži i član drugog reda, pokazuje se da u sredini u kojoj postoji disperzija, talasni paket ne zadržava svoj oblik, već se rasplinjava, što ne odgovara ponašanju čestica.

8.2.1 Talasni paket i Furijeova analiza

Upravo smo videli da se čestica predstavljena talasnom jednačinom lokalizuje u prostoru, tako što se umesto jednim talasom predstavlja skupom talasa koji obrazuju talasni paket. Talasi koji čine talasni paket, moraju da imaju neprekidnu raspodelu talasnih dužina (frekvencija, energija) u okolini De Broljijeve talasne dužine, jer se samo tada postiže željena lokalizacija talasa/čestice. Ovo lako može da se shvati iz ugla Furijeove analize, dodatak D-8.2, iz koje sledi da svaka periodična funk-

cija može da se opiše Furijeovim redom (D-8.2.18), čije komponente imaju diskretnu raspodelu frekvencija. To znači da talas, koji je periodična funkcija u prostoru i vremenu, ima diskretnu raspodelu talasnih vektora, talasnih dužina, frekvencija i energija. Zbog jednostavnosti, posmatraćemo posebno osobine u vremenskom, t, i u prostornom x, domenu:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} g_n e^{+nk_0 t} \tag{8.2.16a}$$

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} g_n e^{+n\omega_0 t} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} g_n e^{+nE_0 t/h}. \tag{8.2.16b}$$

Harmonijske (pravilne sinusne ili kosinusne) oscilacije imaju samo osnovnu komponentu, n=1, dok složeniji oblici oscilovanja imaju veći broj komponenata, n>1. Na Slici D-8.2.6 prikazano je razvijanje beskonačnog pravougaonog talasa u Furijeov red, prema relacijama (8.2.16), za različite vrednosti n. Dakle, razvojem po (8.2.16) periodična funkcija (talas) proizvoljnog oblika, opisuje se preko zbira harmonijskih oscilacija, pri čemu koeficijenti, g_n, koji mogu da se izračunaju po jednačini (D-8.2.21), zavise od oblika talasa.

Talas lokalizovan u prostoru ili vremenu nije beskonačno perodičan, dakle, može da se opiše samo aperiodičnom funkcijom. Za opis aperiodične funkcije preko zbira osnovnih trigonometrijskih funkcija, raspodela frekvencija mora biti neprekidna i tako umesto sume po diskretnim frekvencijama dolazimo do integrala (D-8.2.29). Drugim rečima, talasni paket (aperiodičnu funkciju) možemo da predstavimo slaganjem velikog broja talasa (osnovnih trigonometrijskih funkcija) sa neprekidnom raspodelom talasnih brojeva („za paket" u prostoru) ili frekvencija (za „paket" u vremenu). Po ugledu na (D-8.2.29) nalazimo:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{+ikx} dk \tag{8.2.17a}$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{-i\omega t} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} F(E) e^{-iEt/h} dE. \tag{8.2.17b}$$

Dakle, obvojnicu talasnog paketa, $f(x)$, nalazimo Furijeovom transformacijom funkcije raspodele talasnih brojeva, $F(k)$. U slučaju koji smo ispitivali u ovom odeljku, našli smo izraz za obvojnicu talasnog paketa pri uniformnoj raspodeli talasnih brojeva u intervalu $(k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k)$:

$$A(x, t) = \psi \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(x - \omega' t)\xi} d\xi. \tag{8.2.5}$$

Ako raspodelu talasnih brojeva, $F(k\text{-}k_0)=F(\xi)$, predstavimo odgovarajućom funkcijom:

$$F(\xi) = \Pi_{2\Delta k}(\xi)$$

izraz (8.2.5) možemo da napišemo u obliku Furijeove transformacije:

$$A(x,t) = \psi_0 \int_{-\infty}^{\infty} \Pi_{2\Delta k}(\xi) e^{i(x-\omega' t)\xi} d\xi \tag{8.2.18}$$

i da nađemo rešenje bilo iz tabela Furijeovih transformacija bilo neopsrednim integraljenjem. Recimo, iz jednačine (D-8.2.40), zamenom promenljivih, $\omega \to x - \omega' t$ nalazimo:

$$A = \frac{2\psi_0 \Delta k}{\pi} \frac{\sin[(x-\omega' t)\Delta k]}{(x-\omega' t)\Delta k}. \tag{8.2.19}$$

Poslednji izraz se od (8.2.6) razlikuje za faktor $(1/\pi)$ što je posledica različitog izbora oblika Furijeove transformacije, a što na ovom mestu nije značajno. Najvažnije je da uočimo da između oblika talasnog paketa i raspodele talasnih brojeva postoji jednoznačna veza, tj., obvojnica talasnog paketa i raspodela talasnih brojeva predstavljaju Furijeov transformacioni par, $A(x) \Leftarrow FT \Rightarrow F(k)$. Na primer, ako česticu/talas želimo da ograničimo u prostornom intervalu $(x_0 - \Delta x, x_0 + \Delta x)$, s uniformnom raspodelom, $A(x) \propto \Pi_{2\Delta x}(x)$, tada je $F(k) \propto \mathrm{sinc}(k)$. Dakle, pomoću Furijeove transformacije možemo da odredimo oblik talasnog paketa za proizvodnju raspodelu talasnih brojeva, i obrnuto, da nađemo oblik talasnog paketa za zadatu raspodelu talasnih brojeva.

Primeri

Primer 8.2.1 Izračunati talasnu dužinu De Broljijevih talasa pridruženih atomima helijuma na temperaturu od T=293K i pri pritisku od 1 atm. Uporediti talasnu dužinu helijumovih atoma sa srednjim slobodnim putem. Da li kvantni uticaji ovde igraju neku ulogu?

REŠENJE:

Na osnovu Maksvelove raspodele brzina, srednja brzina υ_{sr} molekula je:

$$\upsilon_{sr} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$$

gde je k Bolcmanova konstanta, T, temperatura, a m masa atoma helijuma. Zamenom ovih vrednosti u prethodnoj jednačini dobijamo:

$$\upsilon_{sr} = \sqrt{\frac{8 \times (1,381 \times 10^{-23}\,\mathrm{J/K}) \times (293\,\mathrm{K})}{3,14270 \times 4 \times 1,661 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}}} = 1,25 \times 10^{3}\, m/\mathrm{s}.$$

Talasna dužina De Broljijevog talasa pridruženog helijumovom atomu je:

$$\lambda = \frac{h}{m\upsilon} = \frac{(6,626\times10^{-34}\text{J})}{(4\times1,661\times10^{-27}\text{kg}\times1,25\times10^{3}\text{m/s})} = 0,798\times10^{-10}\text{m} .$$

Srednji slobodni put δ je:

$$\delta = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi\sigma^2 p}$$

$\pi\delta^2$ je efikasni presek i u ovom slučaju iznosi $1,3\times10^{-19}\text{m}^2$, p je pritisak. Zamenimo sada brojne vrednosti da bismo odredili δ:

$$\delta = \frac{(1,381\times10^{-23}\text{J/K})\times(293\text{K})}{1,414\times(1,3\times10^{-19}\text{m}^2)\times(1,013\times10^{5}\text{Nm}^2)} = 2,88\times10^{-7}\text{m} .$$

Kao i kod rasejavanja sa nepokretnih objekata, kvantne (talasne) osobine čestica ispoljavaju se samo ako je talasna dužina čestice istog reda veličine kao i rastojanje među objektima. Pošto je srednji slobodni put δ daleko veći od De Broljijeve talasne dužine pridružene helijumovom atomu, $\delta \geq\lambda$, kvantni efekti se ne ispoljavaju.

Primer 8.2.2 Izvesti izraz za faznu brzinu De Broljijevih talasa (koji predstavljaju slobodnu česticu) u: a) klasičnom, b) relativističkom slučaju.

REŠENJE:

Iz jednačine 8.2.11 sledi:

$$\upsilon_f = \frac{\omega_0}{k} = \frac{2\pi\nu}{2\pi/\lambda} = \frac{h\nu}{h/\lambda} = \frac{E}{p} .$$

Kako je reč o slobodnoj čestici sa kinetičkom energijom $T = m\upsilon^2/2$:

$$a)\quad \upsilon_f = \frac{m\upsilon^2/2}{m\upsilon} = \upsilon/2; \qquad b)\quad \upsilon_f = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{m\upsilon} = \frac{c^2}{\upsilon} \geq c .$$

Treba, međutim, napomenuti da poslednji rezultat *($\upsilon_f > c$)* nije u protivrečnosti sa teorijom relativnosti jer fazna brzina De Broljijevih talasa ne predstavlja veličinu pridruženu nekom stvarnom fizičkom procesu, koji bi možda mogao da se potvrdi eksperimentalno.

Primer 8.2.3 Pokazati da je u: a) klasičnom, i b) relativističkom slučaju, grupna brzina jednaka brzini kretanja čestice.

REŠENJE:

Iz jednačine (8.2.13) sledi:

$$a)\quad \upsilon_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi\nu)}{d(2\pi/\lambda)} = \frac{2\pi d(h\nu)}{2\pi d(h/\lambda)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{p}{m} = \upsilon$$

jer je $E = T = m\upsilon^2/2$, a $p = m\upsilon$;

$$b)\quad \upsilon_g = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp}\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} = \frac{2pc^2}{2E} = \frac{m\upsilon c^2}{mc^2} = \upsilon\ .$$

Primer 8.2.4 Izračunati De Broljijevu talasnu dužinu elektrona koji u akceleratoru stiču energiju od 10 *M*eV-a.

REŠENJE:

Impuls elektrona izračunaćemo koristeći jednačinu relativističke mehanike (D-7.4.6), jer čestica tako velike energije (10 *M*eV-a) ima relativističku brzinu:

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{T^2+2m_0c^2T}$$

u kojoj je p impuls, T kinetička energija, a m_0 masa mirovanja elektrona, dok je c brzina svetlosti. De Broljijeva talasna dužina je tada:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{T^2+2m_0c^2T}} =$$

$$= \frac{6,626\times10^{-34}\text{Js}\times2,998\times10^{8}\text{ms}^{-1}}{\sqrt{(10^{7}\times1,6\times10^{-19})^2\text{J}^2+2\times10^{7}\times1,602\times10^{-19}\text{J}\times9,109\times10^{-31}\text{kg}\times(2,998\times10^{8})^2m^2s^{-2}}} =$$

$$= \frac{19,864\times10^{-26}}{1,682\times10^{-12}}m = 0,118\times10^{-12}m = 0,118\times10^{-3}nm.$$

Primer 8.2.5 Koliku kinetičku energiju elektron treba da ima pa da njegova De Broljijeva talasna dužina bude jednaka Komptonovoj.

REŠENJE:

Izjednačićemo izraze za De Broljijevu (8.1.1) i Komptonovu talasnu dužinu, a impuls ćemo zameniti koristeći izraz (D-7.4.6) iz relativističke mehanike:

$$\lambda = \lambda_C \quad\Rightarrow\quad \frac{h}{p} = \frac{h}{m_0c} \quad\Rightarrow$$

$$\frac{c}{\sqrt{T^2 + 2m_0c^2T}} = \frac{1}{m_0c} \quad\Rightarrow\quad m\cdot c^2 = \sqrt{T^2 + 2m_0c^2T} \quad\Rightarrow$$

$$T^2 + 2m_0c^2T - m_0^2c^4 = 0 \quad\Rightarrow\quad T = (\sqrt{2}-1)m_0c^2$$

$$= (1,414-1)\times9,109\cdot10^{-31}kg\times(2,998\times10^{8})^2m^2s^{-2} =$$

$$= \frac{3,391\times10^{-14}J}{1,602\times10^{-19}} = 2,117\times10^{5}eV\ .$$

8.3 PRINCIP NEODREĐENOSTI

U makrosvetu (koji opisuje klasična mehanika) stanje sistema definisano je položajem i brzinom (odnosno impulsom) svake njegove čestice u određenom trenutku. Podrazumeva se da ovi parametri mogu da se dobiju merenjem, kao i da proces merenja ostavlja sistem u istom stanju u kojem je bio pre merenja. Dakle, uzajmno dejstvo sistema i mernog uređaja smatra se zanemarljivim. Ako je poznato početno stanje sistema, i sile koje deluju na čestice sistema, tada rešavanjem Njutnovih jednačina kretanja može da se predvidi stanje sistema u bilo kojem budućem momentu. Takođe, podela na talase i čestice se podrazumeva.

Međutim, u mikrosvetu podela na čestice i talase nije moguća. Isti objekat, na primer, elektron, ispoljava čestična odnosno talasna svojstva, zavisno od uslova pod kojima se posmatra. Na primer, u maglenoj komori elektron ostavlja trag kao čestica, dok se sa kristalne rešetke rasejava kao talas. Merenje koje ne predstavlja nikakav pojmovni problem u klasičnoj mehanici, u opisu mikrosveta ima centralnu ulogu. Nemoguće je čak i zamisliti proces merenja koji ne bi uticao na stanje posmatranog mikroobjekta. Drugim rečima, pri preciznom merenju jedne veličine, neka druga veličina se nepredvidivo menja. Skup podataka koji mogu da se dobiju o makroobjektu razlikuje se od onih koji se dobijaju za mikročesticu. Osnovni postulat kvantne mehanike, discipline koje se bavi opisom pojava u mikrosvetu, sadržan je u iskazu da svi podaci o sistemu mogu da se dobiju ako je poznata njegova talasna funkcija.[11] Međutim, može da se pokaže da poznavanje talasne funkcije ne omogućuje izračunavanje svih veličina za koje bi se, slično kao kod makročestica, očekivalo da ih mikroobjekt ima. Relativne odnose među fizičkim parametrima mikroobjekata pri njihovom merenju prvi je formulisao Verner Hajzenberg 1927. godine kao princip neodređenosti. Princip neodređenosti izražava se relacijama neodređenosti. Na jednom predavanju o ovoj temi Hajzenberg je rekao: „*Bliže ispitivanje formalizma pokazuje da između tačnosti sa kojom može da se utvrdi mesto čestice i tačnosti sa kojom istovremeno može da se sazna njen impuls, postoji relacija po kojoj je proizvod verovatnih grešaka u merenju mesta i impulsa bar onoliki kolika je Plankova konstanta podeljena sa* 4π*. Ove relacije neodređenosti za rezultate merenja klasičnih promenljivih daju potrebne uslove da rezultati merenja budu izraženi u formalizmu kvantne teorije. Bor je pokazao kako poremećaj, nužno vezan sa svakim posmatranjem (merenjem) prouzrokuje da ne može da se ide ispod granice tačnosti koju postavljaju relacije neodređenosti. On tvrdi da je u konačnom rezultatu neodređenost, uvedena pomoću pojma merenja i sama odgovorna za deo poremećaja koji u osnovi ostaje nepoznat... Vizuelni opis atomskih pojava moguć je samo u izvesnim granicama tačnosti – ali u tim granicama zakoni klasične fizike još se primenjuju. Štaviše, zbog ovih granica tačnosti koje su definisane relacijama neodređenosti, vizuelna slika atoma nije oslobođena višeznačnosti. Naprotiv, pojmovi čestice i talasa podjednako služe kao osnova za vizuelno tumačenje.*

Zakoni kvantne mehanike u osnovi su statistički. Iako su parametri nekog atomskog sistema određeni u svojoj ukupnosti eksperimentom, rezultat budućeg opažanja sistema ne može uopšte da se tačno predvidi. Ali u svakom kasnijem trenutku ima opažanja iz kojih proizlaze očekivani rezultati. Za druga opažanja mogu da se daju samo verovatnoće za pojedine ishode eksperimenta. Stepen izvesnosti koji je još vezan uz zakone kvantne mehanike odraz je činjenice da su principi o održanju

[11] Talasna funkcija dobija se rešavanjem Šredingerove jednačine koja u mikrosvetu igra onu ulogu koju Njutnove jednačine imaju u klasičnoj mehanici.

energije, impulsa i momenta impulsa još uvek striktno na snazi. Oni mogu biti provereni sa svakom željenom tačnošću i tada će vredeti sa tačnošću sa kojom su provereni."

Prikazaćemo sada Hajzenbergove relacije neodređenosti. Ako sa Δx (Δy, Δz) označimo neodređenost (grešku sa kojom možemo da izvršimo merenje) položaja duž x- (y,z) ose neke mikročestice, tada je neodređenost Δp_x(Δp_y, Δp_z) impulsa p_x (p_y, p_z) ograničena relacijama:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}; \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{h}{4\pi}; \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{h}{4\pi} \tag{8.3.1}$$

koje se nazivaju Hajzenbergove relacije neodređenosti (h je Plankova konstanta) i izražavaju kvantnomehanički princip neodređenosti. Relacije (8.3.1) pokazuju da je proizvod neodređenosti koordinate i impulsa duž te iste koordinate u najboljem slučaju reda veličine Plankove konstante h odnosno da postoji granica tačnosti kojom se istovremeno mogu odrediti merenjem položaj čestice i njen impuls duž iste koordinate. Pod neodređenošću impulsa odnosno koordinate podrazumeva se njihovo srednje kvadratno odstupanje od odgovarajuće srednje vrednosti (impulsa ili koordinate), a relacije smo eksplicitno izveli kao zadatak 9.2.1 u poglavlju 9.2 korišćenjem kvantnomehaničkih postulata. Princip neodređenosti je opšti princip i nije ograničen samo na pojave u mikrosvetu ali se u makrosvetu njegove posledice praktično ne pokazuju jer su neodređenosti koje nastaju iz drugih razloga (netačnost merenja, itd.) mnogo redova veličine veće. Pokažimo ovo na primerima.

Primeri

Primer 8.3.1 Izračunati neodređenost brzine tela koje ima masu 1 g ako je neodređenost njegovog položaja $\Delta x = 10\text{-}4$ cm.

Iz relacije neodređenosti (8.3.1) sledi minimalna neodređenost brzine:

$$\Delta \upsilon_x = \frac{\Delta p_x}{m} = \frac{h}{4\pi m \Delta x} = \frac{(6,6 \times 10^{-34} Js)}{4\pi (10^{-3} kg)(10^{-6} m)} = 5,2 \times 10^{-26} ms^{-1}$$

tj. neodređenost brzine leži daleko izvan granice mogućnosti merenja. Ako istu relaciju primenimo na mikročesticu, dobićemo sasvim drukčiji rezultat.

Primer 8.3.2 Izračunati neodređenost brzine elektrona u atomu.

Neodređenost brzine υ_x zavisi od tačnosti određivanja položaja elektrona Δx. Neka se elektron nalazi u atomu – tada tačnost određivanja njegovog položaja treba da bude bar 10^{-11} m jer su dimenzije atoma 10^{-10} m. Kako je masa elektrona $9{,}1\times10^{-31}$ kg, pomoću (8.3.1) se dobija:

$$\Delta \upsilon_x = \frac{(6,6 \times 10^{-34} Js)}{4\pi (9,1 \times 10^{-31} kg)(10^{-11} m)} = 6,1 \times 10^{6} ms^{-1} \quad .$$

Ako se zna da energiji od 10 eV (što je red veličine energije elektrona u atomskom omotaču) odgovara brzina od $1{,}87 \times 10^6$ ms^{-1}, vidimo da je neodređenost brzine istog reda veličine kao i sama brzina.

Značenje i mesto relacija neodređenosti u odnosu na makro i mikrosvet može da se uporedi s ulogom brzine svetlosti u odnosu klasične (Njutnove) i relativističke (Ajnštajnove) fizike. U klasičnoj fizici posmatraju se objekti koji se kreću brzinama koje su znatno manje od brzine svetlosti i sve dok je tako, Njutnove jednačine daju potpuno tačne rezultate. Ali, kada brzina čestice postane uporediva sa brzinom svetlosti javljaju se kvalitativno nova svojstva koja zahtevaju nove pojmove. Ulogu koju brzina svetlosti ima pri prelasku iz klasične u relativističku fiziku, pri prelasku iz oblasti važenja klasične u kvantnu mehaniku, igra Plankova konstanta.

Sledeća, važna relacija neodređenosti glasi:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{4\pi} \tag{8.3.2}$$

gde je ΔE neodređenost energije, a Δt neodređenost (opsega) vremena. Zajedničko za relacije neodređenosti (8.3.1) i (8.3.2) je da su međusobno povezane veličine čiji proizvod ima dimenzije dejstva (energija · vreme). Tačnije poznavanje jedne od para veličina ima za posledicu veću neodređenost druge. Postoji, međutim, bitna razlika u tumačenju relacija neodređenosti (8.3.1) u odnosu na relaciju (8.3.2). U relacijama neodređenosti koje povezuju koordinatu i impuls duž iste koordinate podrazumeva se da obe veličine mogu da se mere u istom trenutku t. Statistička raspodela rezultata merenja kao i odstupanja $\Delta x \cdot \Delta p_x$ ($\Delta y \cdot \Delta p_y$; $\Delta z \cdot \Delta p_z$) biće određeni talasnom funkcijom sistema u određenom trenutku. U relaciji neodređenosti (8.3.2) povezani su neodređenost energije datog stanja sa vremenom evolucije (promene) energije tog stanja, pa energija sistema koji se u vremenu Δt održava u određenom energijskom stanju, može da se odredi sa tačnošću $\Delta E \geq \hbar / (2 \cdot \Delta t)$. Sa druge strane, relaciju neodređenosti (8.3.2) možemo dovesti u vezu i sa načinom na koji se određuje energija. Tačnost određivanja energije povezuje se tada sa vremenom Δt, koje je potrebno da se merenje obavi. Tako, energija pobuđenog stanja atoma može da se odredi u eksperimentu u kome se ispitivani atomi bombarduju snopom monoenergijskih elektrona, a meri se energija koju elektroni u neelastičnim sudarima sa atomima gube. Vreme merenja ovde ima red veličine vremena sudara, dok neodređenost energije odgovara neodređenosti energije primenjenih elektrona.

Postojanje prirodne širine spektralnih linija predstavlja posledicu važenja relacije neodređenosti. Prema relaciji neodređenosti (8.3.2) proizvod srednjeg vremena života i neodređenosti energije pobuđenog stanja sistema atoma, jezgara, itd. uvek je veći ili jednak $\hbar/2$. O ovome ćemo detaljnije govoriti kasnije.

8.3.1 Talasni paket i relacije neodređenosti

Relacija neodređenosti za impuls i koordinatu

Posmatrajmo slobodnu česticu predstavljenu De Broljijevim talasom, (8.1.23). Zbog jednostavnosti, razmatramo jednodimenzioni slučaj i to u proizvoljnom vremenu, $t=t_0$. Time se izraz za talasnu jednačinu pojednostavljuje, pa iz (8.1.22) dobijamo:

$$\psi(x, t_0) = \psi_0(t_0) e^{\frac{i}{\hbar} p_{0,x} x} \tag{8.3.3}$$

pri čemu smo konstantni fazni faktor, $iE_0t_0/\hbar$ uključili u konstantu $\psi_0(t_0)$. Jednačina (8.3.3) predstavlja talas slobodne čestice koja se s impulsom $p_{0,x}$ kreće duž x-ose a koju posmatramo „zamrznutu" u momentu t_0. Čestica ima dobro određen impuls, $p_{0,x}$, ali je njena koordinata potpuno neodređena pošto se ravanski talas kojim je čestica opisana prostire duž x-ose bez ograničenja. Da bismo česticu lokalizovali treba da saberemo seriju talasa sa neprekidnom raspodelom talasnih brojeva u intervalu $\pm \Delta k$ u okolini talasnog broja nosećeg talasa, k_0. S obzirom na vezu između talasnog broja i impulsa čestice, $p_x = \hbar\, k$, raspodelu talasnih brojeva možemo da izrazimo preko raspodele impulsa u intervalu $(p_{0,x} - b, p_{0,x} + b)$ gde je $p_{0,x}$ impuls čestice. Slično kao kod jednačine (8.2.1), iz (8.3.3) dobijamo izraz za talasni paket (TP):

$$\psi_{TP}(x, t_0) = \psi_0(t_0) \int_{p_{0,x-b}}^{p_{0,x+b}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}\, dp_x \tag{8.3.4}$$

ili, po ugledu na (8.2.18):

$$\psi_{TP}(x, t_0) = \psi_0(t_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \Pi_{2b}(p_x - p_{0,x}) e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}\, dp_x\,. \tag{8.3.5}$$

Poslednji izraz predstavlja Furijeovu transformaciju pravougaone impulsne funkcije. Mada se integral (8.3.5) može naći u tabelama Furijeovih transformacija, a izračunali smo ga i u odeljku D-8.2, vežbe radi, ovde ćemo ponovo da ga izračunamo. Polazeći od (8.3.4), proširenjem diferencijala nalazimo:

$$\psi_{TP}(x, t_0) = \psi_0(t_0)\left(\frac{\hbar}{ix}\right) \int_{p_{0,x-b}}^{p_{0,x+b}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}\, d\left(p_x \frac{ix}{\hbar}\right) \tag{8.3.6}$$

odakle integraljenjem, nakon zamene promenljive i granice integrala, $ip_x x/\hbar \to \xi$, $P_{0,\pm b} \to (P_{0,\pm b})\ \ ix/\hbar$, nalazimo:

$$\psi_{TP}(x, t_0) = \psi_0(t_0)\left(\frac{\hbar}{ix}\right) e^{\xi} \Big|_{\frac{i}{\hbar}x(p_{0,x}-b)}^{\frac{i}{\hbar}x(p_{0,x}+b)}\,. \tag{8.3.7}$$

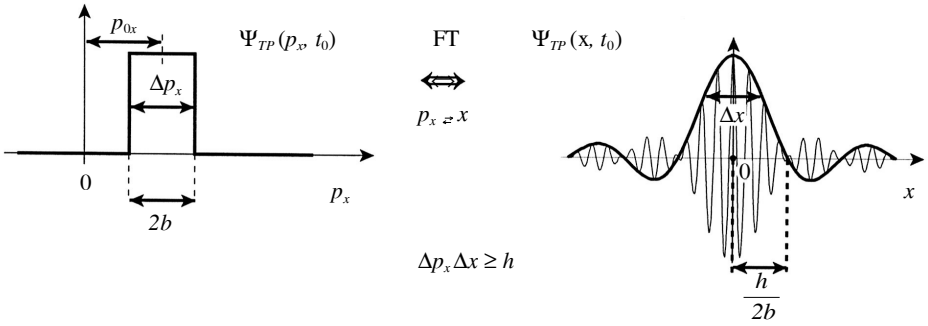
Zamenom granica dobijamo:

$$\psi_{TP}(x, t_0) = \psi_0(t_0)\left(\frac{\hbar}{ix}\right) e^{\frac{i}{\hbar}p_{x,0}x}\left[e^{+\frac{i}{\hbar}bx} - e^{-\frac{i}{\hbar}bx}\right] \tag{8.3.8}$$

a ako uočimo da je izraz u uglastoj zagradi $2i \sin(bx/\hbar)$ lako nalazimo:

$$\psi_{TP}(x, t_0) = 2b\psi_0(t_0)e^{\frac{i}{\hbar}p_{x,0}x}\,\mathrm{sinc}\left(\frac{bx}{\hbar}\right). \tag{8.3.9}$$

Dobijeno rešenje je isto kao (8.2.8) (uz $bx/\hbar = \eta$) ili (D-8.2.40b) (pri $p_{x,0} = 0$). Veza između ograničenja impulsa čestice i njene koordinate, prema (8.3.9), prikazana je na Slici 8.3.1.



Slika 8.3.1 Relacija neodređenosti za impuls i koordinatu. Ako neodređenost impulsa leži u intervalu $2b$, tada je neodređenost koordinate $h/2b$. Sužavanjem intervala $2b$ smanjuje se neodređenost impulsa ali raste neodređenost koordinate, pri čemu važi (8.3.8). Funkcija raspodele impulsa i funkcija raspodele koordinate obrazuju Furijeov transformacioni par. Na slici su pokazani samo realni delovi funkcija.

Impuls čestice je ograničen proizvoljno izabranim intervalom $\pm b$ u okolini impulsa nosećeg talasa, p_{0x}, dok je njen položaj definisan sink funkcijom. Pošto obvojnica sink funkcije $(1/x)$ opada sa rastojanjem od njenog centra težeći asimptotski nuli, čestica nije lokalizovana u jasno definisanom intervalu. Definicija intervala je prilično proizvoljna jer zavisi od odabranog kriterijuma. Na primer, u spektroskopiji, kao osnovni interval uzima se širina krive raspodele na polovini njene visine. Drugi podjednako dobar kriterijum, uobičajen u statistici, je da se interval definiše tako da integral u granicama intervala bude jednak polovini ukupnog integrala funkcije raspodele. Zbog jednostavnosti, kao osnovni interval za sink funkciju, Δx, biramo rastojanje od maksimuma do prve nule. Prva nula se javlja kada je argument funkcije π, pa iz jednačine (8.3.9) nalazimo da je granica intervala u kome pretpostavljamo da je čestica lokalizovana:

$$\frac{b\Delta x}{\hbar} = +\pi$$

a zamenom $\Delta p_x = 2b$ [neodređenost impulsa jednaka je širini odabranog intervala $(p_{0x} - b,\ p_{0x} + b)$] nalazimo vezu između intervala u kome se čestica najverovatnije nalazi, Δx, i intervala u kome se nalazi impuls čestice, Δp_x:

$$\Delta p_x \Delta x = h\,.$$

Pošto postoji konačna verovatnoća da se čestica nađe i van intervala Δx, dakle, moguće je da je neodređenost njenog položaja veća od odabranog intervala, ispravnije je da pišemo:

$$\Delta p_x \Delta x \geq h \,. \tag{8.3.10}$$

Ova relacija kvalitativno izražava Hajzenbergov princip neodređenosti. Iz optike je poznato da se talas ograničen u prostoru ne može smatrati monohromatskim (određene talasne dužine), pa kod njemu odgovarajućeg talasnog paketa [videti i relaciju (D-8.2.43)] važi $\Delta k \cdot \Delta x \sim 2\pi$. Kada se umesto ravnog talasa posmatraju De Broljijevi talasi ili talasi materije ograničeni u prostoru a onda predstave talasnim paketom, dobija se relacija (8.3.10). Podsetimo se na to da je funkcija (jednačina) De Broljijevog talasa dobijena iz jednačine ravnog ugrađivanjem uslova o kvantovanosti energije $\omega = (E/\hbar)$ i $|\vec{p}| = \hbar\ |\vec{k}|$ iz De Broljijeve relacije.

Iz relacije (8.3.10) sledi da koordinata i impuls čestice/talasa, u principu, ne mogu istovremeno da se odrede sa proizvoljnom tačnošću. Povećanje tačnosti pri određivanju jedne veličine neminovno vodi povećanju neodređenosti za drugu. U konkretnom slučaju kada tačno znamo impuls čestice/talasa ništa ne znamo o položaju. Kada česticu/talas lokalizujemo u izvesnom intervalu, Δx, tada i impuls postaje neodređen u intervalu Δp_x, pri čemu je veza između neodređenosti impulsa i koordinate, data relacijom neodređenosti (8.3.10).

Relacija neodređenosti za energiju i vreme

U potpunoj analogiji sa vezom između neodređenosti impulsa i koordinate možemo da izvedemo vezu za neodređenost energije i vremena. Ovog puta, umesto čestice, posmatramo elektromagnetni talas u proizvoljno izabranoj tački prostora, $\vec{r}_0$. Time talasnu funkciju (8.1.23) dobijamo u jednostavnijem obliku:

$$\psi(r_0, t) = \psi_0(r_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \tag{8.3.11}$$

u kome smo konstantan fazni faktor koji zavisi od koordinate i impulsa uključili u konstantu, $\psi_0(r_0)$. Talas je monohromatski, dakle, ima dobro definisanu energiju, E_0, ali se širi beskrajno u vremenu.

Posmatrajmo sada šta se dešava ako se umesto u kontinualnom snopu talas emituje u kratkom pulsu, Δt. Ovo je slučaj koji se često sreće kako kod elementarnih procesa (stimulisana emisija), tako i kod brojnih primena (radio-telegrafija, pulsna spektroskopija, optoelektronika, itd.). Dakle, puls elektromagnetnog talasa lako se realizuje a naš cilj je da takvu situaciju teorijski opišemo. Ovakav oscilatorni proces ograničenog vremena trajanja smatra se kvazimonohromatskim i ubraja u neperiodične procese koji se razlažu u spektar pomoću Furijeove transformacije. U potpunoj analogiji sa lokalizacijom u prostoru, lokalizaciju u vremenu postižemo superpozicijom velikog broja talasa sa promenljivom amplitudom i kontinualnom promenom energije (talasne dužine):

$$\psi_{TP}(r_0, t) = \psi_0(r_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{TP}(r_0, E) e^{\frac{i}{\hbar}Et} dE \,. \tag{8.3.12}$$

Ovaj slučaj se neznatno razlikuje od prethodnog jer raspodelu u vremenu [oblik talasnog paketa (TP)] već znamo:

$$\psi_{TP}(r_0, t) = \psi_0(r_0) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Pi_{2b}(t - t_0) \tag{8.3.13}$$

a tražimo raspodelu energija superponiranih talasa, $\psi(r_0, E)$. Treba da uočimo to da je $\psi_{TP}(r_0, t)$ u izrazu (8.3.12) (inverzna) Furijeova transformacija funkcije $\psi_{TP}(r_0, E)$. Transformacijama tipa (D-8.2.38) ili iz poznatog odnosa direktne i inverzne Furijeove transformacije, (D-8.2.37), lako nalazimo da je:

$$\psi_{TP}(r_0, E) = f_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{TP}(r_0, t) e^{+\frac{i}{\hbar}Et} dt \,. \tag{8.3.14}$$

Konstantu f_1, koja zavisi od načina predstavljanja Furijeove transformacije, nema potrebe da preciziramo. Zamenom izraza (8.3.13) u (8.3.14) dobijamo funkciju raspodele energija talasa čiji zbir formira pravougaoni talasni puls, širine $2b$*:*

$$\psi_{TP}(r_0, E) = \psi'_0(r_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \Pi_{2b}(t - t_0) e^{+\frac{i}{\hbar}(E - E_0)t} dt \,. \tag{8.3.15}$$

Nova konstanta pred integralom, ψ' uključuje sve prethodne i nećemo je bliže određivati. Istim postupkom kao u prethodnom odeljku nalazimo:

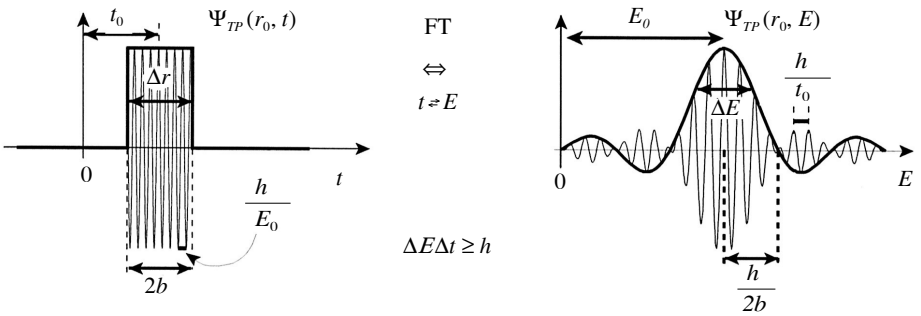
$$\psi_{TP}(r_0, E) = 2b\psi'_0(t_0) e^{\frac{i}{\hbar}(E - E_0)t_0} \sin c\left(\frac{b(E - E_0)}{\hbar}\right) \tag{8.3.16}$$

i koristeći iste kriterijume za definisanje osnovog intervala, ΔE, i iste argumente ($\Delta t = 2b$) nalazimo da je:

$$\Delta E \Delta t \geq h. \tag{8.3.17}$$

Dakle, kod pravougaonog pulsa monohromatskog elektromagnetnog zračenja energija je raspodeljena u okolini prvobitne energije, E_0, u intervalu, ΔE, koji je obrnuto

proporcionalan širini pulsa. Veza između neodređenosti energije i neodređenosti vremena za ovaj slučaj, prikazana je na Slici 8.3.2.



Slika 8.3.2 Relacija neodređenosti za energiju i vreme. Ako je talas lokalizovan u vremenskom intervalu $2b$ tada je neodređenost njegove energije $h/2b$. Funkcija raspodele talasa u vremenu i funkcija raspodele njegove energije obrazuju Furijeov transformacioni par. Na slici su pokazani samo realni delovi funkcija.

Za lokalizaciju talasa i raspodelu njegove energije važne su samo obvojnice funkcija. Brze oscilacije funkcije u vremenskom domenu predstavljaju oscilovanje električnog ili magnetnog vektora elektromagnetnog talasa. Brze oscilacije u energijskom domenu fizički nisu značajne jer se pri izračunavanju proizvoda $\psi\psi^*$ (množenju konjugovano kompleksnih brojeva) gube.

8.3.2 Prirodna širina spektralnih linija

Prirodna širina spektralnih linija je direktna posledica principa neodređenosti. Posmatrajmo sistem u kome je u trenutku, $t_0 = 0$, pobuđeno N_0 atoma. Iz pobuđenog stanja atomi spontano prelaze u osnovno, emitovanjem kvanta energije ili predajom energije u sudarima sa drugim atomima. Proces je statističke prirode, pa ne može da se predvidi kada će određeni atom preći iz pobuđenog u osnovno stanje. Međutim, može da se predvidi koji će deo od ukupnog broja atoma, u intervalu Δt (između t i $t + \Delta t$) ostati u pobuđenom (ekscitovanom) stanju. U kratkom vremenskom intervalu, Δt, brzina kojom se atomi vraćaju iz pobuđenog u osnovno stanje, $\Delta N(t)\Delta t$ proporcionalna je broju pobuđenih atoma, $N(t)$:

$$\frac{\Delta N}{\Delta t} = -\zeta N(t)\,. \tag{8.3.18}$$

Negativni znak pokazuje to da broj pobuđenih atoma opada sa vremenom. Konstanta brzine, ζ (zeta), predstavlja relativno smanjenje broja pobuđenih atoma (u odnosu na njihov trenutni broj) u jedinici vremena. Za dovoljno kratko Δt, sa konačnih razlika možemo da pređemo na diferencijale:

$$\frac{dN}{dt} - \zeta N(t). \tag{8.3.19}$$

Integraljenjem, uz početni uslov $N(0) = N_0$, nalazimo da broj pobuđenih atoma eksponencijalno pada sa vremenom:

$$N(t) = N_0 e^{-\zeta t}. \tag{8.3.20}$$

Mada ne možemo da predvidimo osobine pojedinih atoma, pomoću jednačine (8.3.20) možemo da izračunamo broj pobuđenih atoma u svakom trenutku. Slično, možemo da definišemo srednje vreme života atoma, τ, kao zajedničku osobinu sistema kao celine, iako ne znamo stvarna vremena života pobuđenog stanja za pojedinačne atome. Srednje vreme života računamo tako što ukupno vreme života svih atoma u pobuđenom stanju (uvž) podelimo sa ukupnim brojem pobuđenih atoma:

$$\tau = \frac{\text{ukupno vreme života svih atoma u pobuđenom stanju}}{\text{ukupan broj pobuđenih atoma}} = \frac{1}{N_0}\,\text{uvž}. \tag{8.3.21a}$$

Ukupan broj pobuđenih atoma, N_0, znamo iz početnog uslova. Ukupno vreme života svih pobuđenih atoma određujemo na sledeći način. Prvo, za svako vreme, $t \in (0,\infty)$, nađemo broj atoma koji su se vratili u osnovno stanje u intervalu (t, $t + dt$). Taj broj jednak je broju atoma čije je vreme života t. Oni koji su se u osnovno stanje vratili ranije, živeli su kraće od t a oni koji su još u pobuđenom stanju živeće duže. Iz jednačine (8.3.19) nalazimo da je broj atoma koji se vrati u osnovno stanje u intervalu (t, $t + dt$), $dN(t)/dt$, jednak $\zeta N(t)$. Pri tome negativni znak ignorišemo jer nas ne zanima da li broj N raste ili opada. Dakle, broj atoma koji su u pobuđenom stanju proveli vreme t je ζN a njihovo ukupno vreme života je $t\zeta N$. Ukupno vreme života svih pobuđenih atoma nalazimo sabiranjem vremena života atoma iz svih intervala dt, dakle integraljenjem proizvoda $t\zeta N$ po vremenu:

$$\text{uvž} = \int_0^\infty t\zeta N dt = \zeta N_0 \int_0^\infty t e^{-\zeta t} dt$$

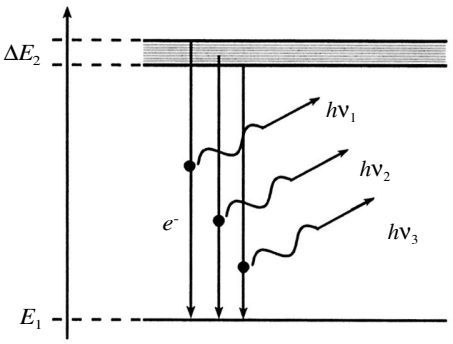
gde smo izraz na desnoj strani dobili zamenom N iz (8.3.20). Tada, prema (8.3.21a) nalazimo:

$$\tau = \zeta \int_0^\infty t e^{-\zeta t} dt = \frac{1}{\zeta}. \tag{8.3.21b}$$

Integral u poslednjem izrazu lako se nalazi parcijalnim integraljenjem. Dakle, srednje vreme pobuđenog stanja, τ, jednako je recipročnoj vrednosti konstante brzine ζ. Pošto je fizički smisao srednjeg vremena očigledniji, često je izraz (8.3.20) pogodnije pisati u ekvivalentnom obliku:

$$N(t) = N_0 e^{-t/\tau}. \tag{8.3.22}$$

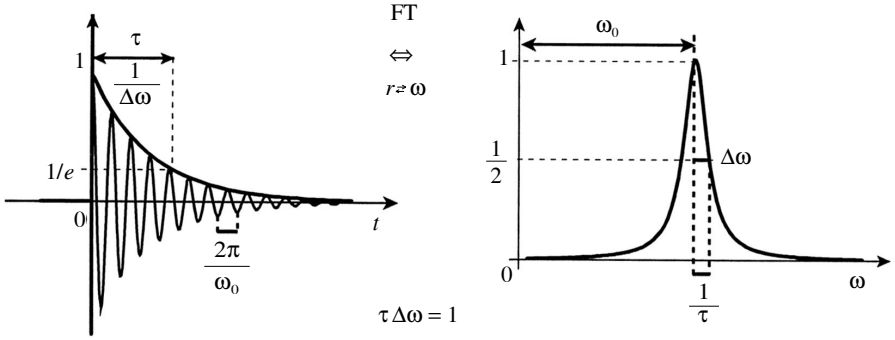
Sa stanovišta principa neodređenosti, ograničeno vreme života pobuđenog stanja može se smatrati kao lokalizacija u vremenu. Tada, prema relaciji (8.3.17) nalazimo:



Slika 8.3.3 Vreme života pobuđenog stanja i raspodela energija emitovanog zračenja. Zbog ograničenog vremena života pobuđenog stanja (lokalizacije u vremenu) dolazi do pojave neodređenosti energije pobuđenog stanja i do raspodele frekvencija emitovanog zračenja. To se eksperimentalno ispoljava kao širenje spektralne linije emitovane pri prelazu elektrona iz E_2 u E_1.

$$\Delta E \geq \frac{h}{\tau} \tag{8.3.23}$$

dakle, ograničen vek pobuđenog stanja dovodi do pojave neodređenosti energije pobuđenog stanja. Za razliku od pobuđenog stanja, u osnovnom stanju atom boravi proizvoljno dugo vremena, pa može da se uzme da je za osnovno stanje neodređenost vremena beskonačna. Tada iz relacije neodređenosti sledi da je energija atoma u osnovnom stanju potpuno tačno određena (odnosno da je neodređenost nula). Prema tome, pri prelazu atoma iz pobuđenog u osnovno stanje, prirodna širina spektralne linije posledica je neodređenosti energije pobuđenog stanja, Slika 8.3.3.



Slika 8.3.4 Prirodna širina spektralne linije $\Delta\omega$ je direktna posledica konačnog vremena života pobuđenog stanja, τ. Prema jednačini (8.3.31) poluširina na poluvisini linije obrnuto je proporcionalna vremenu života pobuđenog stanja. Obvojnica spektralne linije i kriva raspada pobuđenog stanja obrazuju Furijeov transformacioni par. Pokazane funkcije su normalizovane prema sopstvenim maksimalnim vrednostima.

Relativno širenje linije, $\Delta v / v$, lako nalazimo iz jednačine (8.3.23) deljenjem celog izraza sa hv:

$$\frac{\Delta v}{v} \geq \frac{1}{\tau v} \tag{8.3.24a}$$

a s obzirom na vezu $v = c/\lambda$, sledi $|\Delta\lambda/\lambda| = \Delta v/v$ odnosno:

$$\left|\frac{\Delta\lambda}{\lambda}\right| \geq \frac{\lambda}{\tau c}. \tag{8.3.24b}$$

Treba uočiti to da je proizvod τv jednak broju oscilacija električnog (ili magnetnog) vektora u talasnom paketu koji se obrazuje za vreme elementarnog akta emisije. Isto tako, količnik $\tau c/\lambda$ predstavlja broj talasnih dužina elektromagnetnog talasa unutar emitovanog talasnog paketa. Dakle, relativno širenje spektralne linije može se shvatiti i kao neodređenost broja oscilacija ili broja talasnih dužina u talasnom paketu koji se emituje u vremenu života pobuđenog stanja. Na primer, za spektralnu liniju natrijuma čija je talasna dužina 589 nm, a vreme života pobuđenog stanja 10^{-8} s iz odnosa (8.3.24b) nalazimo:

$$\left|\frac{\Delta\lambda}{\lambda}\right| \geq \frac{589\times10^{-9}m}{3\times10^{8}ms^{-1}\times10^{-8}s} \approx 2\times10^{-7} \tag{8.3.24c}$$

ili množeći izraz sa λ, $\Delta\lambda \geq 10^{-4}$ nm. Ovako malo širenje linije u vidljivom delu spektra teško je eksperimentalno opaziti jer drugi uzroci (na primer, Doplerov efekt) šire liniju mnogo više. Međutim, u drugim spektralnim područjima vreme života pobuđenog stanja često je glavni uzrok za širenje spektralnih linija te se preko širine linije vreme života najjednostavnije i određuje.

Širenje spektralne linije zbog ograničenog vremena života pobuđenog stanja još elegantnije možemo da analiziramo koristeći Furijeovu transformaciju. Posmatrajmo isti sistem u kome je promena broja pobuđenih atoma tokom vremena određena jednačinom (8.3.22). Povratkom u osnovno stanje pobuđeni atomi emituju elektromagnetne talase frekvencije $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$. Amplituda talasa emitovanog u intervalu $(t, t + dt)$ proporcionalna je broju atoma koji se u tom intervalu vraćaju u osnovno stanje, $dN(t)/dt$, a prema izrazu (8.3.19) proporcionalna je broju pobuđenih atoma, $N(t)$. Dakle, emitovano zaračenje opisujemo ravanskim talasom prema jednačini (D-3.1.13):

$$\psi(t) = A(t)e^{-i\omega_0 t} \tag{8.3.25}$$

čija se amplituda, $A(t)$, menja tokom vremena prema jednačini (8.3.22). Zamenom promenljive amplitude iz (8.3.22) nalazimo jednačinu emitovanog talasa:

$$\psi(t) = \psi_0 e^{-t/\tau} e^{-i\omega_0 t}. \tag{8.3.26}$$

Konstanta ψ_0 zavisi od početnih uslova i nećemo je bliže određivati. Amplitudu emitovanog zračenja koja se menja tokom vremena možemo da predstavimo slaganjem velikog broja talasa sa neprekidnom raspodelom frekvencija, čija amplituda zavisi od frekvencije. Međutim, u ovom slučaju kao i u prethodnom, zavisnost amplitude od vremena znamo a tražimo zavisnost amplitude od frekvencije. Kako smo pokazali u prethodnom odeljku, jednačina (8.3.14), zavisnost amplitude od frekvencije, $\psi(\omega)$, nalazimo Furijeovom transformacijom zavisnosti amplitude u vremenu, $\psi(t)$:

$$\psi(\omega) = f_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(t) e^{+i\omega t}\, dt. \tag{8.3.27}$$

Zamenom jednačine talasa $\psi(t)$ u poslednjem izrazu iz (8.3.26) nalazimo:

$$\psi(\omega) = \psi_0' \int_{0}^{+\infty} e^{-t/\tau} e^{+i(\omega-\omega_0)t}\, dt \tag{8.3.28}$$

pri čemu smo sve konstante spojili u novu konstantu ψ'_0. Promenili smo i donju granicu integraljenja s obzirom na početni uslov $\psi(t<0) = 0$. Ovim uslovom izražavamo činjenicu da se sistem pre pobude (dakle za $t<0$) nalazi u osnovnom stanju i ne emituje zračenje. Poslednji integral može da se nađe u tablicama Furijeovih transformacija a može lako i da se izračuna.

Množenjem podintegralnih funkcija nalazimo:

$$\psi(\omega) = \psi'_0 \int_{0}^{+\infty} e^{+[i(\omega-\omega_0)-1/\tau]t}\, dt \tag{8.3.29a}$$

a smenama:

$[i(\omega-\omega_0)-1/\tau]t \to \xi,\ dt \to d\xi/\ [i(\omega-\omega_0)-1/\tau],\ t\in(0,\infty) \to \ \in (0,-\infty)$

(poslednjom smenom menja se gornja granica integraljenja jer je izraz u uglastoj zagradi negativan)

$$\psi(\omega) = \frac{\psi_0'}{i(\omega-\omega_0)-1/\tau} \int_{0}^{-\infty} e^{\xi} d\xi = \frac{\psi_0'}{i(\omega-\omega_0)-1/\tau}(0-1) = \frac{\psi_0'}{1/\tau - i(\omega-\omega_0)}. \tag{8.3.29b}$$

Proširivanjem razlomka sa $1/\tau + i(\omega-\omega_0)$ i sređivanjem konačno dobijamo:

$$\psi(\omega) = \psi'_0 \left(\frac{\tau}{1+(\omega-\omega_0)^2\tau^2} + i\frac{\tau(\omega-\omega_0)}{1+(\omega-\omega_0)^2\tau^2} \right). \tag{8.3.29c}$$

Raspodela amplitude zračenja u funkciji frekvencije predstavlja spektar zračenja. Dakle, našli smo da je spektar zračenja kompleksna funkcija. Ovde nas zanima samo realni (apsorpcioni) deo spektra, $S(\omega)$, pa ćemo imaginarni (disperzioni) deo ispustiti iz analize:

$$S(\omega) = S_0 \frac{1}{1+(\omega-\omega_0)^2\tau^2}. \tag{8.3.30}$$

Ovaj oblik raspodele često se sreće u spektroskopiji i naziva se Lorencova linija, Slika 8.3.4. Lorencova linija ima maksimum kada je $\omega = \omega_0$, $S(\omega_0) = S_0$. Poluširinu linije na poluvisini, $\Delta\omega$, nalazimo iz uslova $S(\Delta\omega) = S_0/2$ što zamenom u (8.3.30) daje:

$$\Delta\omega = 1/\tau \tag{8.3.31}$$

znači, poluširina linije na njenoj poluvisni obrnuto je proporcionalna vremenu života pobuđenog stanja iz koga se linija emituje; skraćenje života pobuđenog stanja dovodi do širenja spektralne linije.

U vezi sa relacijom neodređenosti, širina spektralne linije u direktnoj je vezi sa neodređenošću energije pobuđenog stanja. Dakle, skraćenje života pobuđenog stanja dovodi do porasta neodređenosti njegove energije. Zaista, množenjem izraza (8.3.31) Plankovom konstantom nalazimo:

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} \tag{8.3.32a}$$

gde je ΔE poluširina na poluvisini raspodele energija u pobuđenom stanju. Koristeći iste argumente kao i pre (moguća su odstupanja energije i veća od ΔE) dobijamo relaciju neodređenosti za energiju i vreme:

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\tau}. \tag{8.3.32b}$$

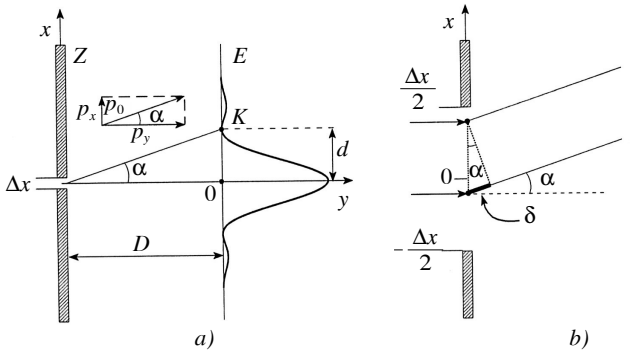
Ovaj rezultat se nešto razlikuje od ranije dobijenih relacija (8.3.17) i (8.3.23) što je posledica proizvoljnosti pri definisanju intervala u kome se lokalizuje određeni parametar. Na primer, da smo umesto poluširine na poluvisini, kao osnovni interval koristili punu širinu linije na njenoj poluvisini pojavio bi se još i faktor 2, $\tau\Delta E = 2\hbar$. Dakle, proizvoljnost u izboru osnovnog intervala daje različite rezultate koji su, međutim, u saglasnosti sa strogo izvedenom relacijom neodređenosti $(\tau\Delta E \geq \hbar/2)$.

Dakle, prirodna širina spektralne linije određena je vremenom života pobuđenog stanja što je u punoj saglasnosti sa relacijom neodređenosti.

8.3.3 Difrakcija elektrona i relacija neodređenosti

Svi eksperimenti, zamišljeni ili stvarni, u kojima se ispoljava dvojna priroda materije moraju biti saglasni sa principom neodređenosti. To možda nije uvek očigledno ali detaljnijom analizom svakog takvog eksperimenta dolazi se do jednog od oblika relacije neodređenosti.

Pokazaćemo sada kako do relacije neodređenosti (8.3.1) može da se dođe analizom rasejavanja elektrona na jednom prorezu, Slika 8.3.5. Elektroni padaju u smeru y-ose na zaklon Z sa prorezom širine Δx. Prolaz elektrona kroz prorez registruje se bljeskom (scintilacijom) koji elektron izaziva pri udaru u fluorescentni ekran, E. Rasejavanjem na prorezu elektroni stvaraju difrakcionu sliku, kao što je već opisano u odeljku 8.1.3. Prema klasičnom talasnom tumačenju, rasejavanjem jednog talasa dobija se cela difrakciona slika. Novi talasi samo pojačavaju sliku koja je od početka dobijena u celini. Međutim, kada se elektroni puštaju jedan po jedan



Slika 8.3.5 Difrakcija elektrona pri prolazu kroz jedan prorez: a) šematski prikaz eksperimenta. Z je neprozirni zaklon sa prorezom širine Δx. Elektroni koji prođu kroz prorez na fluorescentnom ekranu D obrazuju difrakcionu sliku; b) geometrija rasejavanja elektrona.

vide se pojedinačni bljeskovi na ekranu, dakle, elektroni na ekran stižu kao čestice. Međutim, ako se kroz prorez propusti dovoljno veliki broj elektrona dobija se ista difrakciona slika koju bi dali i *x*-zraci iste talasne dužine. To znači da se difrakciona slika dobija kao zbirni rezultat velikog broja prispelih elektrona. Mada je „putanja" pojedinog elektrona nepredvidiva, oblik difrakcione slike može se izračunati na osnovu poznatih parametara De Broljijevog talasa pridruženog elektronu i geometrije eksperimentalnog uređaja.

Izaberimo dve tačke u prorezu na međusobnom rastojanju $\Delta x/2$, i nađimo uslov za destruktivnu interferenciju za talase koji prolaze kroz njih, Slika 8.3.5b. Do uzajamnog gašenja talasa koji skreću pod uglom α, dolazi kada je putna razlika među njima, δ, polubrojni umnožak talasnih dužina, $\delta = (2n-1)\lambda/2$, gde je n ceo broj a λ talasna dužina. Sa Slike 8.3.5b nalazimo vezu između putne razlike, δ i ugla skretanja, α: $\delta = (\Delta x/2)\sin\alpha$, odakle nalazimo uslov za pojavu prvog minimuma (n=1) na difrakcionoj slici:

$$\frac{1}{2}\lambda = \frac{\Delta x}{2}\sin\alpha \tag{8.3.33a}$$

odnosno:

$$\lambda = \Delta x \sin\alpha . \tag{8.3.33b}$$

Svakoj tački u gornjoj polovini proreza možemo da pridružimo po jednu tačku u donjoj polovini, na rastojanju $\Delta x/2$, pa se, prema uslovu (8.3.33b) svi zraci koji prolaze kroz prorez i skreću pod uglom α, međusobno poništavaju. Dakle, položaj prvog minimuma na difrakcionoj slici određen je jednačinom (8.3.33b).

Neodređenost *x*-koordinate mlaza elektrona koji prolazi kroz prorez jednaka je širini proreza, Δx. Sužavanjem proreza položaj mlaza elektrona određujemo sa sve većom tačnošću. Međutim, pri konstantnoj talasnoj dužini elektrona, sužavanje proreza dovodi do porasta ugla pod kojim se nalazi prvi difrakcioni minimum, jednačina (8.3.33b). Sa čestične tačke gledišta, pojavu difrakcije elektrona možemo da

shvatimo kao međudejstvo elektrona sa ivicima proreza, u kojem elektron stiče komponentu impulsa p_x u pravcu x-ose, usled čega i skreće za mali ugao α. Pošto elektroni padaju normalno na prorez (pravac x-ose) to je prvobitna komponenta impulsa duž x ose jednaka nuli. Nakon rasejanja, elektroni koji skreću dobijaju komponentu impulsa koja je proporcionalna uglu skretanja, Slika 8.3.5a:

$$p_x = p\sin\alpha . \tag{8.3.34}$$

Prema slici na fluorescentnom ekranu, na kojem preovlađuje široka središnja svetla mrlja, može da se zaključi da najveći broj elektrona prolazi kroz prorez bez skretanja (α=0), ali da ima i elektrona koji skreću pod uglom koji je između nula (p_x=0) i α, a koji odgovara položaju prvog minimuma (p_x). Neodređenost x-komponente impulsa Δp_x elektrona je, prema tome:

$$\Delta p_x = p\sin\alpha - 0 = p\sin\alpha. \tag{8.3.35}$$

Kombinujući talasnu jednačinu za difrakciju (8.3.33b) sa jednačinom za impuls skrenute čestice (8.3.34) nalazimo:

$$\frac{\lambda}{\Delta x} = \frac{\Delta p_x}{p} \tag{8.3.36}$$

odnosno:

$$\Delta x \Delta p_x = \lambda p. \tag{8.3.37}$$

Zamenom proizvoda λ_p iz De Broljijeve jednačine (8.1.1) nalazimo da je:

$$\Delta x \Delta p_x = h. \tag{8.3.38}$$

Uslov (8.3.38) važi samo za elektrone koji sa prvobitnog pravca skreću u prvi difrakcioni minimum. Pošto se elektroni rasejavaju i pod većim uglovima obrazujući seriju maksimuma i minimuma, još opštiji uslov je i:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h . \tag{8.3.39}$$

Dakle, pri rasejanju elektrona na jednom prorezu, nemoguće je jednovremeno izmeriti koordinatu i komponentu impulsa elektrona duž iste koordinate.

Sada ćemo isti eksperiment razmotriti malo detaljnije i, pored relacije neodređenosti, pronaći difrakcionu sliku koja nastaje rasejavanjem elektrona na jednom prorezu. Opet posmatramo De Broljijev talas koji na prorez širine Δx (centriran oko koordinatnog početka, $\pm\Delta x/2$) pada u pozitivnom smeru y-ose, Slika 8.3.5a. Dužina proreza je mnogo veća od njegove širine pa je merljivo skretanje talasa samo u pravcu x-ose. Stoga je dovoljno da posmatramo dvodimenzioni De Broljijev talas. Tada jednačina talasa (8.1.23) postaje:

$$\psi(x,y,t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_{0x}x + p_{0y}y - E_0 t)} . \tag{8.3.40a}$$

Upadni talas se kreće u pravcu *y*-ose pa je za njega $p_{0,x} = 0$ a $p_{0,y} = p_0$. U tačku *K* na ekranu stiže deo talasa koji nakon prolaska kroz prorez skreće pod uglom α. Po ugledu na (8.3.40a) jednačina takvog talasa je:

$$\psi(x,y,t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y - E_0 t)} \tag{8.3.40b}$$

gde je energija talasa ista kao pre skretanja, E_0, a zbog skretanja menjaju se komponente impulsa. Dakle, zrak menja pravac ali ne menja energiju (frekvenciju). Nove komponente impulsa nalazimo projektovanjem impulsa na odgovarajuće ose. Sa Slike 8.3.5 a nalazimo, i:

$$p_x = p_0 \sin\alpha = p_0 \frac{d}{D}, \quad p_y = p_0 \cos\alpha \approx p_0 \tag{8.3.41):}$$

gde je *d* rastojanje između tačke *K* i koordinatnog početka (položaja u koji pada neskrenuti zrak) a *D* rastojanje između proreza i ekrana. Pri tome smo uzeli da je ugao α dovoljno mali $(\cos\alpha \approx 1)$ da možemo da zanemarimo promenu *y*-komponente impulsa. Zamenom impulsa iz (8.3.41) u (8.3.40b) dobijamo, i:

$$\psi'(x,y,t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{d}{D}p_0 x + p_0 y - E_0 t\right)}. \tag{8.3.42}$$

Rezultujući talas u tački *K* dobijamo sabiranjem svih talasa po *x*-dimenziji proreza:

$$\psi(d,t) = \psi'_0 \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{d}{D}p_0 x + p_0 y - E_0 t\right)} dx. \tag{8.3.43a}$$

Ovaj integral možemo svesti na poznati oblik ako konstantne članove izvučemo pred integral i ako uvedemo pravougaonu funkciju koja nam omogućuje da promenimo granice integraljenja:

$$\psi(d,t) = \psi'_0 e^{\frac{1}{\hbar}(p_0 y - E_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} \Pi_{\Delta x}(x) e^{\frac{i}{\hbar}\frac{d}{D}p_0 x} dx. \tag{8.3.43b}$$

Prepoznajemo da je integral Furijeova transformacija pravougaone funkcije i po ugledu na jednačine (8.3.5) i (8.3.15) nalazimo:

$$\psi(d,t) = \psi''_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 y - E_0 t)} \sin c\left(\frac{p_0 \Delta x}{2\hbar D} d\right). \tag{8.3.43c}$$

Zbog jednostavnosti sve konstante koje se javljaju pri izračunavanju Furijeove transformacije ubacili smo u novi član ψ_0''. Dobijeni izraz predstavlja talas koji se kreće duž *y*-ose sa nepromenjenom energijom, E_0, a čija amplituda je modulisana sink funkcijom. Dakle, rasejani De Broljijev talas elektrona, na fluorescentnom ekranu daće difrakcionu sliku čiji profil je kvadrat sink funkcije iz (8.3.43c):

$$S(d) = S_0 \sin c^2\left(\frac{p_0 \Delta x}{2\hbar D} d\right) \tag{8.3.44a}$$

ili izražavajući rastojanje d preko x-komponente impulsa prema jednačini (8.3.41):

$$S(p_x) = S_0 \sin c^2\left(\frac{p_x \Delta x}{2\hbar}\right). \tag{8.3.44b}$$

Već smo ranije videli da ova funkcija ima prvi par nula za vrednost argumenta $\pm\pi$, pa uzimajući kao i pre da je osnovni interval neodređenosti jednak rastojanju prve nule od centra, $S(\Delta p_x) = 0$ nalazimo:

$$\Delta p_x \Delta x = h \tag{8.3.45}$$

odnosno:

$$\Delta p_x \Delta x \geq h. \tag{8.3.46}$$

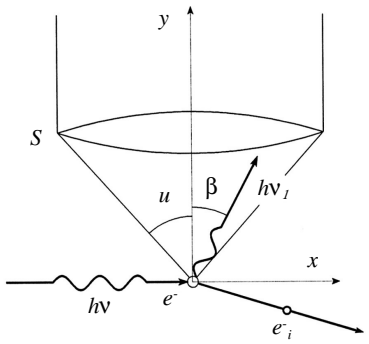
Dakle, detaljnom analizom nalazimo istu relaciju između neodređenosti impulsa i neodređenosti koordinate za elektrone koji se rasejavaju na uskom prorezu, ali smo našli i da difrakciona slika predstavlja Furijeovu transformaciju difrakcionog elementa, u ovom slučaju proreza. Kao i pre, sledi da je relacija neodređenosti posledica dvojne prirode materije.

8.3.4 Relacija neodređenosti i merenje položaja elektrona

Nemogućnost istovremenog eksperimentalnog određivanja položaja i impulsa mikroobjekta (elektrona) sa proizvoljnom tačnošću prikazaćemo zamišljenim primerom detektovanja elektrona mikroskopom. Proces detektovanja sastoji se u tome da elektron obasjavamo svetlošću određene talasne dužine λ i da detektujemo odbijeno zračenje. Biće detektovani samo oni fotoni koje elektron raseje u prostorni ugao u određen geometrijom delova uređaja, Slika 8.3.6. Tačnost određivanja položaja elektrona ogranična je veličinom koja se zove moć razlaganja mikroskopa. Ona predstavlja najmanje rastojanje Δx na kojem mogu da se nalaze dve tačke, a da se mikroskopom uočavaju kao razdvojene. Po jednačini iz optike, ovo rastojanje dato je kao:

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin u}. \tag{8.3.47}$$

Neodređenost položaja elektrona Δx, biće manja ako je manja talasna dužina svetlosti λ. Fotoni svetlosti manje talasne dužine nose, međutim, veću energiju i u sudaru sa elektronom mogu da mu značajno promene impuls (Komptonov efekt). Predajući elektronu impuls p, foton skreće sa svog prvobitnog pravca kretanja krećući se pod određenim uglom β u odnosu na osu mikroskopa. Opažanje rasejanog fotona mikroskopom znači istovremeno i detektovanje elektrona. U ovom eksperimentu ugao β pod kojim foton skreće može da se odredi samo približno i u slučaju detekto-



Slika 8.3.6 Pošto je ugao β manji od aperturnog ugla u sočiva, S, dolazi do detektovanja elektrona u položaju e^-: međutim, usled međudejstva sa fotonom elektron je promenio položaj te se stvarno nalazi u tački prostora e^-_1.

vanja elektrona sigurno ima vrednost između vrednosti *0* i *u*. Zbog toga je *x*-komponenta impulsa fotona neodređena do vrednosti (*hν/c*) sin *u*, gde je *ν* frekvencija upadnog značenja, a *c* brzina svetlosti. Kako je ovaj iznos impulsa elektron primio sudarom sa fotonom, izraz (*hν/c*) sin *u* predstavlja ujedno i neodređenost njegovog impulsa duž *x*-ose. Kombinovanjem ovog izraza sa (8.3.47) dobija se:

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\lambda}{\sin u} \frac{h\nu}{c} \sin u = h.$$

Dakle, u procesu merenja položaja elektrona došlo je do neizbežne promene njegovog impulsa, koja je utoliko veća ukoliko je merenje položaja bilo tačnije.

Iz ovih primera vidimo da Hajzenbergov princip neodređenosti ima univerzalni karakter. Sve pojave u prirodi ispunjavaju ograničenja nametnuta relacijom neodređenosti, samo što značaj tog ograničenja zavisno od uslova, može da se proteže od izuzetno velikog do zanemarljivog. Osnovni kriterijum je veličina posmatranog dejstva (dejstvo = energija · vreme) u odnosu na Plankovu konstantu. Ako je dejstvo istog reda veličine onda se uticaj relacije neodređenosti neposredno ispoljava. Ako je pak dejstvo veliko u odnosu na Plankovu konstantu, tada se i relacija neodređenosti može zanemariti.

Primeri

Primer 8.3.1 Polazeći od relacije neodređenosti oceniti energiju veze elektrona u osnovnom stanju atoma vodonika kao i odgovarajuće rastojanje elektrona od jezgra.

REŠENJE:

Ukupna energija atoma vodonika, *E* je zbir potencijalne, *U* (4.2.6) i kinetičke, *T*, energije:

$$E = U + T .$$

Kinetičku energiju računamo po poznatom obrascu T=($m\Delta\upsilon^2$)/2 a brzinu $\Delta\upsilon$ procenjujemo iz Hajzenbergove relacije neodređenosti (8.3.10):

$$\Delta r m\Delta\upsilon \sim \frac{r}{2}m\Delta\upsilon \geq \frac{h}{4\pi},\ \Delta\upsilon = \frac{h}{2\pi rm},\ T = \frac{m\Delta\upsilon^2}{2} = \frac{h^2}{8\pi^2 r^2 m}\ . \qquad \text{(P-8.3.1)}$$

Pri pisanju Hajzenbergove relacije pretpostavili smo da je $\Delta r \sim r/2$ kao i $\Delta\upsilon \sim \upsilon$ (što smo i dokazali ranije ali ove pretpostavke ukazuju na to da rezultate koje dobijemo treba shvatiti kvalitativno-zato u zadatku i piše „oceniti") kao i uvek kada pomoću opštevažećeg Hajzenbergovog principa neodređenosti pokušamo da izračunamo neku konkretnu veličinu. Hajzenbergova relacija neodređenosti pimenjena na atom vodonika veoma liči na Borov kvantni uslov (razlika je u faktoru 1/2).

Sada možemo napisati izraz za ukupnu energiju u koju ćemo uvrstiti kinetičku energiju iz (P-8.3.1) i potražiti prvi izvod ukupne energije E po r koordinati. Izjednačavanjem prvog izvoda sa nulom odredićemo vrednost r za koju energija E ima ekstremnu (minimalnu vrednost). Ovo se može dokazati ispitivanjem drugog izvoda izraza E:

$$E = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} + \frac{h^2}{8\pi^2 r^2 m},\ \frac{dE}{dr} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} - \frac{2h^2}{8\pi^2 m r^3} = 0 \Rightarrow r = \frac{\varepsilon_0}{\pi}\frac{h^2}{me^2}. \qquad \text{(P-8.3.2)}$$

Zamenićemo sada u jednačini (P.8.3.2) brojne vrednosti za Plankovu konstantu h, masu i naelektrisanje elektrona m i e kao i električnu propustljivost vakuuma ε_0 i izračunati r:

$$r = \frac{8,85\times10^{-12}\ \mathrm{J^{-1}\,c^2\,m^{-1}}\times(6,63\times10^{-34})^2\ \mathrm{J^2\,s^2}}{3,14\times(1,60\times10^{-19})^2\ \mathrm{C^2}\times 9,109\times10^{-31}\ \mathrm{kg}} = \frac{3,89\times10^{-78}}{7,34\times10^{-68}} = 5,29\times10^{-11}\ \mathrm{m}.$$

Energiju veze osnovnog stanja (stanja sa najnižom energijom) dobićemo kada r zamenimo u izraz za ukupnu energiju:

$$E = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^2} = \frac{9,11\times10^{-31}kg\times(1,60\times10^{-19})^4C^4}{8\times(8,85\times10^{-12})^2J^{-2}C^4m^{-2}(6,63\times10^{-34})^2J^2s^2} =$$

$$= \frac{6,00\times10^{-106}}{2,75\times10^{-88}\times1,60\times10^{-19}} = 13,6eV\ .$$

Rezultati koje smo dobili identični su onima koje daje Borov atomski model. Uporediti a relacijama (4.2.12) i (4.2.14).

Primer 8.3.2 U Milikenovom eksperimentu za određivanje elementarnog naelektrisanja meri se vreme za koje (naelektrisane) uljane kapi pređu određeni put. Neka je kap mase $7{,}10\times10^{-15}$ kg prešla put od $15\pm0{,}5$ podeoka za 10 sekundi (50 podeoka je 5 mm). Tačnost određivanja vremena $\Delta t = 0{,}1s$. Odrediti eksperimentalnu vrednost proizvoda neodređenosti (grešaka) impulsa i položaja čestice $\Delta x\Delta p$ i uporediti

je sa minimalnim proizvodom neodređenosti koji sledi iz Hajzenbergove relacije neodređenosti.

REŠENJE:

Neka je brzina čestice υ :

$$\upsilon = \frac{x}{t} = 1,5 pod/s = 1,5 \times 10^{-4}\ \mathrm{ms}^{-1},\ \frac{d\upsilon}{\upsilon} = \frac{dx}{x} + \frac{\dot{d}t}{t}\ .$$

Prema teoriji grešaka $d\upsilon$ možemo napisati kao $\Delta\upsilon$:

$$\Delta\upsilon = \frac{\Delta x \cdot \upsilon}{x} + \frac{\Delta t \upsilon}{t}$$

a zatim izračunati proizvod $\Delta x \Delta p$: uzimajući da je $\Delta x = 0,5$ podeoka $= 5 \times 10^{-5}$ m:

$$\Delta x \Delta p = \Delta x m \Delta\upsilon = \frac{m\Delta x^2 \upsilon}{x} + \frac{m\Delta x \Delta t \upsilon}{t}$$

$$= \frac{7,1 \times 10^{-15} \times (5 \times 10^{-5})^2 \times 1,5 \times 10^{-4}}{1,5 \times 10^{-3}} + \frac{7,1 \times 10^{-15} \times 5 \times 10^{-5} \times 0,1 \times 1,5 \times 10^{-4}}{10}$$

$$= 2,3 \times 10^{-24} Js = 3,9 \times 10^{9} h\ .$$

Dakle, proizvod neodređenosti položaja i impulsa, $\Delta x\ \Delta p$ u ovom eksperimentu mnogo je veći od minimalne vrednosti određene Hajzenbergovom relacijom.

8.4 ŠREDINGEROVA JEDNAČINA

DODATAK 8.4

D-8.4.1 Operatori

Glavnu ulogu u matematičkoj strukturi kvantne mehanike imaju operatori. Operator je simbol za primenu određene matematičke operacije na nekoj funkciji. Kada operator $\hat{A}$ (simbolom ^ označavamo da je A operator) primenimo na funkciju f dobija se nova funkcija ϕ :

$$\phi = \hat{A} f\ . \qquad \text{(D-8.4.1)}$$

U kvantnoj mehanici najčešće se koriste multiplikativni (specijalni slučaj je množenje konstantom) i diferencijalni operatori. Multiplikativnim operatorom x funkcija $f(x)$ prosto se množi sa x a diferencijalnim d/dx se diferencira. Kada funkcija nije diferencijabilna operator ne može delovati na nju, što znači da određeni operator ne može delovati na svaku funkciju. Zato se definiše skup funkcija na koje određeni operator deluje a takav skup se naziva oblašću definisanosti operatora.

Primer: Odrediti funkciju ϕ koja se dobija dejstvom diferencijalnog operatora d/dx na funkciju sin x:

$$\phi = \frac{d}{dx}\sin x = \cos x.$$

Operatori mogu imati i vektorski oblik. Takav je operator ∇ (nabla):

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k} \ . \qquad \text{(D-8.4.2)}$$

Od bitnog značaja u tekstu koji sledi biće Laplasov operator:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2}. \qquad \text{(D-8.4.3)}$$

U okviru algebre operatora uvode se određene relacije između njih:
a) Operatori su međusobno jednaki ako imaju istu oblast definisanosti i ako delujući na istu funkciju daju isti rezulat;
b) Operator C je suma operatora A i B kada je:

$$\hat{C} = \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x) = \hat{B}f(x) + \hat{A}f(x);$$

c) Proizvod operatora A i B, C definiše se kao:

$$\hat{C}f(x) = \hat{A}\hat{B}f(x) = \hat{A}[\hat{B}f(x)].$$

Na funkciju prvo deluje bliži operator (B) pa se na rezultat primeni dalji. U opštem slučaju je:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

tj. operacija množenja operatora nije komutativna. Razlika:

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A},\hat{B}]$$

naziva se komutator operatora A i B. Kada je $[A,B] = 0$ operatori komutiraju i zovu se komutirajući.

Primer: Odrediti komutator operatora x i d/dx:

$$x\frac{d}{dx} = x\frac{df}{dx}; \quad \frac{d}{dx}[xf(x)] = f(x) + \frac{df}{dx} \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx} = 1 + x\frac{d}{dx} - x\frac{d}{dx} = 1.$$

U kvantnoj mehanici nas gotovo isključivo interesuju linearni operatori. Operator je linearan ako delujući na proizvoljne funkcije $c_1 f$ i $c_2 f_2$ (c_1 i c_2 su konstante) važi:

$$\hat{L}(c_1 f_1 + c_2 f_2) = c_1\hat{L}f_1 + c_2\hat{L}f_2.$$

Svojstveni problem operatora

Ako se dejstvom operatora $\hat{A}$ na funkciju *f* dobije ista ta funkcija pomnožena nekom konstantom *a* (brojem):

$$\hat{A}f = af \tag{D-8.4.4}$$

funkcija *f* naziva se svojstvena funkcija a konstanta *a* svojstvena vrednost operatora $\hat{A}$.

Primer: Ispitati da li se dejstvom operatora *-i(d/dx)* (*i* je imaginarna jedinica) na funkciju $c_1 e^{ikx}$ dobija jednačina tipa (D-8.4.4):

$$-i\frac{d}{dx}(c_1 e^{ikx}) = -i^2 k c_1 e^{ikx} = k(c_1 e^{ikx})$$

Dakle, funkcija $c_1 e^{ikx}$ je svojstvena funkcija operatora *-i(d/dx)* dok je svojstvena vrednost realni broj *k*. Određeni operator može imati jednu, nekoliko ili beskonačno mnogo svojstvenih vrednosti. Skup svojstvenih vrednosti operatora naziva se spektrom (svojstvenih vrednosti). U prvom slučaju svojstvene vrednosti čine diskretan skup brojeva, u drugom one mogu imati bilo koju vrednost iz nekog kontinualnog intervala. Spektri mnogih operatora imaju kako diskretan, tako i kontinualan deo. Ako jednoj svojstvenoj vrednosti odgovara samo jedna svojstvena funkcija, svojstvena vrednost se naziva nedegenerisana. Ako istoj svojstvenoj vrednosti odgovara više od jedne svojstvene funkcije:

$$\hat{A}f_1 = af_1$$
$$\hat{A}_2 f_2 = af_2$$
$$\cdots$$
$$\cdots$$
$$\hat{A}_i f_i = af_i$$

svojstvena vrednost *a* je degenerisana. Pri tome se pod različitim svojstvenim funkcijama podrazumevaju međusobno linearno nezavisne funkcije. Maksimalan broj linearno nezavisnih funkcija koje odgovaraju jednoj svojstvenoj vrednosti određuje strepen degeneracije date svojstvene vrednosti. Postoji teorema koja kaže da bilo koja linearna kombinacija svojstvenih funkcija koje odgovaraju istoj svojstvenoj vrednosti operatora je, takođe, svojstvena funkcija koja odgovara istoj svojstvenoj vrednosti operatera.

Ermitski operatori

Naročit značaj imaju u kvantnoj mehanici ermitski operatori jer su njihove svojstvene vrednosti realne. Operator je ermitski kada važi:

$$\int f_1^* \hat{\Omega} f_2 dx = \int (\hat{\Omega} f_1)^* f_2 dx. \tag{D-8.4.5}$$

Sa f_1 i f_2 označili smo funkcije a sa $\hat{\Omega}$ operator.

D-8.4.2 Osnovni pojmovi teorije verovatnoće i matematičke statistike

Pojave nastale kao rezultat složenog uzročnog lanca događaja koji se u svim detaljima ne može poznavati nazivamo slučajnim događajima. Veličina koja određuje stepen mogućnosti dešavanja jednog događaja pod određenim uslovima naziva se verovatnoća. Verovatnoća nekog događaja procenjuje se na osnovu niza eksperimenata pri kojima taj događaj može da se realizuje (izuzetno, u izvesnim idealizovanim slučajevima može se unapred znati verovatnoća pojavljivanja nekog događaja). Neka se u nizu realizacija događaj A javi n puta; tada se broj n naziva frekvencija pojavljivanja događaja A. Odnos frekvencije n i ukupnog broja eksperimenata N je relativna frekvencija događaja A, $f(A)$:

$$f(A) = \frac{n}{N}. \tag{D-8.4.6}$$

Verovatnoća pojavljivanja događaja A definiše se kao granična vrednost kojoj teži relativna frekvencija, pri beskonačnom ponavljanju eksperimenata:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{n}{N} = P(A). \tag{D-8.4.7}$$

Za potpun sistem događaja $(A,B,....L)$ (skup događaja od kojih se u jednom eksperimentu mora dogoditi jedan i samo jedan) je:

$$\sum_{i=A}^{L} f_i = 1 \qquad \sum_{i=A}^{L} P_i = 1. \tag{D-8.4.8}$$

Ako su verovatnoće nesaglasnih događaja $A,B,....$ (pojava jednog isključuje pojavu drugog) $p(A)$, $p(B)$,... respektivno, tada je verovatnoća da nastupi bar jedan od njih $p(A+B+.)$:

$$P(A + B + \ldots) = P(A) + P(B) + \ldots \tag{D-8.4.9}$$

Verovatnoća zajedničkog nastupanja međusobno nezavisnih događaja A, B... jednaka je proizvodu verovatnoća svakog od tih događaja:

$$P(A, B\ldots) = P(A)P(B)\ldots \tag{D-8.4.10}$$

Slučajnom veličinom nazivamo veličinu koja u jednoj realizaciji eksperimenata može imati samo jednu, unapred nepoznatu vrednost - to je u stvari, slučajan događaj koji ima i kvantitativan izraz (brojnu vrednost). Slučajne veličine mogu uzimati diskretne vrednosti ili bilo koju vrednost iz nekog (konačnog ili beskonačnog) intervala. Zakon raspodele slučajne veličine je zavisnost između vrednosti koje slučajna veličina može da ima i verovatnoće njihovog pojavljivanja.

Funkcija raspodele

Neka je X slučajna veličina, a x proizvoljan realan broj. Definišemo funkciju raspodele $F(x)$ kao verovatnoću da u jednom eksperimentu X uzme vrednost manju od x;

$$F(x) = P(X < x). \tag{D-8.4.11}$$

Neke osobine $F(x)$:

$$0 \le F(x) \le 1; \quad F(-\infty) = 0; \quad F(+\infty) = 1.$$

U slučaju kontinualne slučajne veličine X postoji nenegativna funkcija $F(x)$ takva da je:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)dx \tag{D-8.4.12}$$

$f(x)$ je funkcija gustine (raspodele) verovatnoće. $F(x)\,dx$ predstavlja verovatnoću da slučajna veličina uzme vrednost iz intervala između x i $x+dx$. Osobine funkcije $f(x)$:

$$f(x) \ge 0; \quad P(x_1 \le X \le x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1. \tag{D-8.4.13}$$

Brojne karakteristike slučajne veličine

Ako u nizu od n eksperimenata slučajna veličina X uzme diskretne verednosti x_1, n_1 puta x_2, n_2 puta,... x_i, n_i puta, definišemo srednju vrednost neke funkcije $\varphi(x_1)$, $\langle \varphi(x_1) \rangle$:

$$\langle \varphi(x) \rangle = \frac{n_1\varphi(x_1) + n_2\varphi(x_2) + n_m\varphi(x_m)}{n} = \sum_{i=1}^{m} \varphi(x_i) f_i. \tag{D-8.4.14}$$

Ako je X kontinualna slučajna veličina srednja vrednost funkcije $\varphi(x)$ je:

$$\langle \varphi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) f(x) dx. \tag{D-8.4.15}$$

Kada je $\varphi(x_i) = x_i$, jednačina (D-8.4.14) definiše aritmetičku sredinu (srednju vrednost):

$$\langle x \rangle = \frac{n_1x_1 + n_2x_2 + n_mx_m}{n} = \sum_{i=1}^{m} x_i f_i. \tag{D-8.4.16}$$

Kada broj eksperimenata $n \to \infty$ $f_i \to p_i$ (verovatnoći), a:

$$\langle x \rangle \to \sum_{i=1} x_i p_i = M(x). \tag{D-8.4.17}$$

Veličina $M(x)$ naziva se *matematičkim očekivanjem*. Za kontinualnu slučajnu veličinu:

$$M(x) = \int_{\infty}^{+\infty} xf(x)dx\,. \tag{D-8.4.18}$$

Rasturanje eksperimentalnih podataka oko srednje vrednosti (aritmetičke sredine) karakteriše se *disperzijom D*. Za diskretnu slučajnu veličinu:

$$D = \sum_{i=1}^{m} (x_i - \langle x\rangle)^2 f_i\,. \tag{D-8.4.19}$$

Kada $n \to \infty$:

$$D = \sum_{i} (x_i - M)^2 p_i\,. \tag{D-8.4.20}$$

Za kontinualnu slučajnu veličinu:

$$D = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - M)^2 f(x)dx\,. \tag{D-8.4.21}$$

Disperzija se često izračunava na osnovu sledeće relacije:

$$D = \sum_{i=1}^{m} (x_i - \langle x\rangle)^2 f_i = \sum_{i=1}^{m} x^2{}_i\, f_i - 2\langle x\rangle \sum_{i=1}^{m} x_i f_i + \langle x\rangle^2 \sum_{i=1}^{m} f_i =$$

$$= \sum_{i=1}^{m} x_i^2 f_i - \langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\,. \tag{D-8.4.22}$$

Veličina:

$$\sigma = \sqrt{D} \tag{D-8.4.23}$$

naziva se neodređenošću ili srednjom kvadratnom greškom.

Do sada smo posmatrali slobodne mikročestice i pokazali da njihovo kretanje može da se opiše De Broljijevim ravnim talasom. Sada želimo da nađemo mogućnost za proučavanje kretanja čestica u poljima različitih sila. Polazeći od prirode i osobina koje poseduju mikročestice i talasi a koje smo proučili u prethodnim poglavljima, formulisaćemo diferencijalnu jednačinu koja predstavlja osnovnu jednačinu za opisivanje pojava u mikrosvetu a koju je 1926. godine predložio Ervin Šredinger [Ervin Schrödinger (1887–1961), 1933. dobio Nobelovu nagradu za fiziku]. Šredingerova jednačina ima u kvantnoj mehanici ulogu analognu Njutnovim jednačinama u klasičnoj mehanici.

Zavisno promenljiva Šredingerove diferencijalne jednačine naziva se talasna funkcija i ona se tradicionalno obeležava sa Ψ. Talasna funkcija je u opštem slučaju funkcija koordinata, prostornih i spinskih, i često i vremena, i njome se predstavlja stanje sistema. Kada se sistem nalazi u stacionarnom stanju, talasna funkcija ne zavisi od vremena.

Talasna funkcija, koja je rešenje Šredingerove jednačine, sadrži sve podatke o sistemu. Kada je poznat oblik talasne funkcije, tada mogu da se izračunaju sve važne veličine za dati sistem, odnosno sve veličine koje u principu mogu da se mere. Ako se zna oblik talasne funkcije u početnom trenutku i polje sila, rešavanjem vremenski zavisne Šredingerove jednačine može da se odredi talasna funkcija, odnosno stanje sistema u svakom trenutku. Talasna funkcija je kompleksna funkcija te sama nema fizičko značenje. Međutim, proizvod funkcije Ψ i njoj konjugovano kompleksne funkcije Ψ^* realna je veličina kojoj se pridružuje određeni fizički smisao (gustina verovatnoće).

Kao i druge osnovne jednačine fizike (Njutnove, Maksvelove) Šredingerova jednačina se ne izvodi, već se postulira. Šredingerova jednačina je nerelativistička jednačina i može se primeniti samo na čestice koje se kreću brzinama koje su mnogo manje od brzina svetlosti. Ona, takođe, ne uzima u obzir spin.

Posmatrajmo slobodnu česticu mase m koja se kreće brzinom zanemarljivo malom u odnosu na brzinu svetlosti. Kinetička energija i impuls čestice povezani su tada jednačinom:

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)\,. \tag{8.4.1}$$

Potencijalna energija slobodne čestice, U, jednaka je nuli, pa je ukupna energija jednaka njenoj kinetičkoj energiji.

Prema De Broljijevoj ideji, čestici možemo da pridružimo odgovarajući talas. Uzimajući u obzir izraz (D-3.1.6), lako nalazimo veze između čestičnih (energija E, impuls $\vec{p}$) i talasnih (frekvencija ω, talasni vektor $\vec{k}$) svojstava:

$$E = \hbar\omega\,,\ |\vec{p}| = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar|\vec{k}|\,,\ p_x = \hbar k_x\,,\ p_y = \hbar k_y\,,\ p_z = \hbar k_z\,. \tag{8.4.2}$$

Zamenom komponenti impulsa iz (8.4.2), u (8.4.1) nalazimo vezu između frekvencije i talasnog broja De Broljijevog talasa:

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\,. \tag{8.4.3}$$

Međutim, ova jednačina nam ništa ne govori o obliku De Broljijevog talasa odnosno o promeni talasa kada na česticu deluje neka sila. Da bismo našli tu vezu, i jednačinu De Broljijevog ravnog talasa (8.1.23):

$$\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} \tag{8.4.4}$$

izražavamo preko talasnog broja i frekvencije:

$$\Psi = Ae^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}. \tag{8.4.5}$$

Sada tražimo zavisnost talasne funkcije od vremena i prostornih koordinata kada se čestica nađe u polju neke spoljašnje sile. Diferenciranjem funkcije (8.4.5) jednom po vremenu:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi, \qquad \omega = -\frac{1}{i\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{8.4.6}$$

i dva puta po koordinatama:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = (i)^2k_x^2\Psi = -k_x^2\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} = -k_y^2\Psi, \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = -k_z^2\Psi$$

dobijamo:

$$k_x^2 = -\frac{1}{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}, \qquad k_y^2 = -\frac{1}{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}, \qquad k_z^2 = -\frac{1}{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}. \tag{8.4.7}$$

Uvrštavanjem izraza za ω iz (8.4.6) i k_x^2, k_y^2 i k_z^2 iz (8.4.7) u jednačinu (8.4.3) dobijamo *vremenski zavisnu Šredingerovu jednačinu za slobodnu česticu*:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right). \tag{8.4.8}$$

Ovo je parcijalna diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu i drugog reda po koordinatama. Ovakve jednačine se najlakše rešavaju metodom razdvajanja promenljivih. Rešenje tražimo u obliku proizvoda dve funkcije od kojih jedna zavisi samo od vremena, a druga samo od koordinata:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)f(t). \tag{8.4.9}$$

Tada su izvodi po vremenu i koordinatama:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \psi\frac{df}{dt}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = f\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}, \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} = f\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}, \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = f\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}. \tag{8.4.10}$$

Zamenom dobijenih diferencijala u jednačinu (8.4.8), dobijamo:

$$-\frac{\hbar}{i}\psi\frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}f\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right). \tag{8.4.11}$$

Podelimo jednačinu (8.4.11) sa ψf:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right). \tag{8.4.12}$$

Leva strana (8.4.12) sadrži funkciju f koja zavisi samo od vremena, a desna funkciju ψ zavisnu od prostornih koordinata. Kako su vreme i prostorne koordinate međusobno nezavisne promenljive, jednakost leve i desne strane biće zadovoljena samo ako su one jednake nekoj konstanti koju ćemo obeležiti sa E:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = E \tag{8.4.13}$$

odnosno:

$$\frac{df}{f} = -\frac{iE}{\hbar}dt. \tag{8.4.14}$$

Jednačina (8.4.14) može lako da se integrali:

$$\int\frac{df}{f} = -\frac{iE}{\hbar}\int dt \Rightarrow \ln f = -\frac{i}{\hbar}Et + \ln C$$

odnosno:

$$f = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{8.4.15}$$

gde je C konstanta integraljenja. Dobili smo, naravno, istu zavisnost talasne funkcije od vremena kao u (8.4.5) jer se na početku i zahtevalo da rešenje Šredingerove diferencijalne jednačine bude funkcija De Broljijevog talasa. Upoređivanjem (8.4.15) i (8.4.5) vidimo da je konstanta razdvajanja koju smo (ne slučajno) označili sa E, zaista jednaka energiji čestice.

Izjednačavanjem desnog dela jednačine (8.4.12) sa konstantom E dobijamo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) = E$$

a množenjem jednačine sa ψ i uvođenjem Laplasovog operatora:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

dobijamo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi. \tag{8.4.16}$$

Jednačina (8.4.16) predstavlja stacionarnu Šredingerovu jednačinu za slobodnu česticu. Kako je u ovom slučaju potencijalna energija čestice U jednaka nuli, E predstavlja istovremeno i kinetičku i ukupnu energiju čestice.

Stacionarnu Šredingerovu jednačinu (8.4.16) uopštićemo za slučaj kada se čestica kreće u polju sile. Čestica ukupne energije E, koja je prema uslovu (8.4.13) konstantna, u polju spoljašnje sile stiče potencijalnu energiju, U. Tada je njena kinetička energija jednaka razlici ukupne i potencijalne, $E - U$, što zamenom u jednačinu (8.4.16) daje:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi . \tag{8.4.17}$$

Time smo dobili opšti oblik *stacionarne Šredingerove jednačine*. Kada potencijalna energija U ne zavisi eksplicitno od vremena, što je slučaj koji će nas isključivo interesovati, vremenska zavisnost talasne funkcije je i za česticu u potencijalnom polju data jednačinom (8.4.15), pri čemu E kao i pre predstavlja ukupnu energiju.

Vremenski zavisna Šredingerova jednačina za česticu čija je potencijalna energija U je:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi . \tag{8.4.18}$$

U poređenju s izrazom (8.4.8) poslednja jednačina ima dodatni član kojim se opisuje uticaj spoljašnjih sila na kretanje čestice. Međutim, zbir članova na desnoj strani predstavlja ukupnu energiju čestice jer član sa Laplasovim operatorom odgovara kinetičkoj energiji.

Šredingerova jednačina je po svojoj matematičkoj strukturi parcijalna diferencijalna jednačina u kojoj se javljaju prvi parcijalni izvod funkcije Ψ po vremenu i drugi izvodi funkcije Ψ po prostornim koordinatama. Šredingerova jednačina se često naziva i **talasna jednačina** iako njena formalna sličnost sa talasnom diferencijalnom jednačinom (D-3.1.14), čije je jedno rešenje jednačina ravnog talasa (D-3.1.13) nije potpuna. Naime, Šredingerova jednačina je parcijalna diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu i drugog po koordinatama dok je talasna diferencijalna jednačina drugog reda i po vremenu i po koordinatama. Zato je u formalnom pogledu Šredingerova jednačina sličnija npr., diferencijalnoj jednačini iz klasične fizike koja opisuje difuziju čestica u prostoru i vremenu. Sa druge strane, stacionarna Šredingerova jednačina (8.4.16) ima oblik jednačine stojećih talasa. Prema tome, u svim slučajevima kada nas interesuje prostorna zavisnost talasne funkcije, naziv talasna je sasvim odgovarajući. Inače, izraz **talasna funkcija** za funkcije koje su rešenja Šredingerove jednačine je svuda u širokoj upotrebi.

U opštem slučaju, talasna funkcija Ψ je kompleksna funkcija, pa joj zbog toga nije moguće pripisati fizički smisao. Međutim, proizvod funkcije Ψ i njoj konjugovano kompleksne funkcije Ψ^* je realna funkcija:

$$\Psi\Psi^* = \left(\psi^* e^{+\frac{i}{\hbar}Et}\right)\left(\psi\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right) = \psi\psi^* \tag{8.4.19}$$

kojoj se može dati fizički smisao.

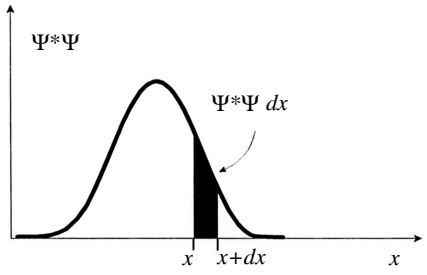
8.4.1 Bornovo tumačenje talasne funkcije

Statističko tumačenje talasne funkcije Ψ predložio je Maks Born (Max Born, 1882–1970, za istraživanja u kvantnoj mehanici a naročito za njenu intepretaciju dobija 1954. godine Nobelovu nagradu za fiziku). Potrebno je, međutim, istaći bitnu razliku između statističkog koncepta u klasičnoj i kvantnoj mehanici. U klasičnoj fizici statistički pristup se koristi iz praktičnih razloga – za sisteme s ogromnim brojem čestica nemoguće je poznavati početne koordinate i impulse svih čestica. U kvantnoj mehanici mora se pribeći statističkim predstavama jer postoji ograničenje mogućnosti poznavanja početnih koordinata i momenata koje je sadržano u relaciji neodređenosti. Kvantna mehanika je suštinski statistička disciplina – ona u principu daje iskaze o verovatnoćama i kada je reč o sistemima sa malim brojem čestica.

Originalno Šredingerovo tumačenje talasne funkcije, Ψ, zasniva se na pretpostavci o stvarnosti postojanja talasa materije. Čestica, na primer, elektron, „razmazana" je u prostoru, a funkcija $\Psi\ (x, y, z, t)$ je povezana sa gustinom „elektronskog oblaka" u tački sa koordinatama (x, y, z) i u trenutku t. Sama talasna funkcija, pošto je najčešće kompleksna, nije pogodna za opisivanje funkcije gustine (koja mora biti realna). Umesto talasne funkcije gustini se pridružuje proizvod $\Psi\Psi^*$ koji je realna funkcija. Međutim, ovakvo tumačenje talasne funkcije, nailazi na teškoće pri opisivanju višečestičnih sistema. Na primer, talasna funkcija za dve čestice određena je u šestodimenzionom prostoru i nemoguće joj je pridružiti stvarne talase materije u smislu originalne Šredingerove ideje.

Born je 1926. godine predložio da se proizvod $\Psi\Psi^*$ proglasi **funkcijom gustine verovatnoće** i ovakvo tumačenje talasne funkcjie predstavlja jedan od **postulata** kvantne mehanike. Tako je u jednodimenzionom slučaju, Slika 8.4.1, verovatnoća nalaženja čestice u intervalu $(x, x + dx)$, u trenutku t određena je proizvodom:

$$\Psi^*(x,t)\ \Psi\ (x,t)dx.$$



Slika 8.4.1 Bornovo tumačenje talasne funkcije u jednoj dimenziji. Proizvod $\Psi^*\ \Psi dx$ predstavlja verovatnoću da se čestica nađe u intervalu dx u okolini tačke sa koordinatom x.

Slično, u trodimenzionom slučaju, verovatnoća nalaženja čestice u elementu zapremine $dx\ dy\ dz$ data je proizvodom:

$$\Psi^*(x,y,z)\,\Psi\,(x,y,z)\,dx\,dy\,dz. \tag{8.4.20}$$

Proizvod $\Psi^*\Psi$ označava verovatnoću po jediničnoj zapremini (u jednodimenzionom slučaju po jediničnoj dužini), dakle, predstavlja gustinu verovatnoće; ima dimenzije recipročne zapremine (dužine). Verovatnoća nalaženja čestice u elementu zapremine $dx\,dy\,dz$ dobija se kada se $\Psi^*\Psi$ pomnoži zapreminom elementa. U končanoj zapremini, V, verovatnoću nalaženja čestice nalazimo sabiranjem verovatnoća za elemenarne zapremine, tj., integraljenjem izraza (8.4.20) po celoj zapremini V:

$$p_V = N^2 \int_V \Psi^*\Psi dx\,dy\,dz \tag{8.4.21a}$$

gde je N konstanta normiranja. Problem normiranja se javlja otuda što je $N\Psi$ jednako dobro rešenje Šredingerove jednačine kao i samo Ψ. Međutim, konstantu normiranja lako izračunavamo na osnovu toga što znamo da nalaženju čestice bilo gde u prostoru, odgovara siguran događaj, koji po definiciji ima jediničnu verovatnoću:

$$N^2 \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi dx\,dy\,dz = 1 \tag{8.4.21b}$$

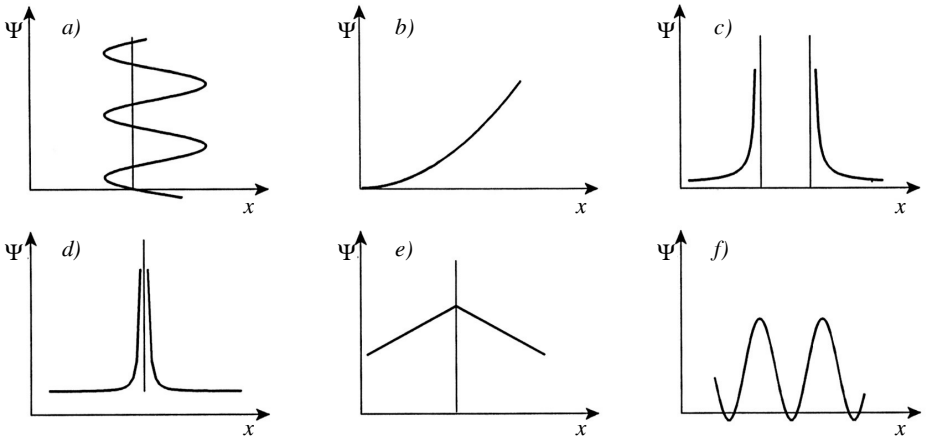
odakle rešavanjem po N nalazimo:

$$N = \frac{1}{\sqrt{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi dx\,dy\,dz}}. \tag{8.4.21c}$$

Jednačina (8.4.21b) označava **uslov normiranj**a **talasne funkcije**.

Bornovim tumačenjem koje je izraženo jednačinom (8.4.21a) posredno se postavljaju zahtevi o matematičkoj prirodi talasne funkcije. Talasna funkcija mora da bude **jednoznačna**, jer jedna čestica ne može da ima različite verovatnoće nalaženja u istoj tački prostora, Slika 8.4.2a. Iz uslova normiranja sledi da talasna funkcija mora da bude **konačna** u konačnom delu prostora jer integral (8.4.21a) mora da bude konačan u svim delovima prostora, Slika 8.4.2b i 8.4.2c. Međutim, talasna funkcija može da liči na Dirkovu δ-funkciju, tj., da ima jako veliku vrednost u veoma malom delu prostora a da pri tome vrednost integrala $\Psi^*\Psi$ po tom vrlo malom delu prostora bude konačna, Slika 8.4.2d. Ovakva talasna funkcija odgovara čestici koja ima tačno određen položaj u prostoru.

Kako je Šredingerova jednačina diferencijalna jednačina drugog reda po koordinatama, to talasna funkcija Ψ i njen prvi izvod moraju da budu neprekidni da bi drugi izvod uopšte postojao, Slika 8.4.2f. U izvesnim slučajevima uslov da prvi izvod talasne funkcije mora da je, takođe, neprekidna funkcija nije matematički strogo ispunjen. Na primer, na granici dve oblasti koordinata potencijal, a time i talasna funkcija, mogu da imaju skokovitu promenu. Ovo je slučaj kod čestice u pravougaonoj jami, o čemu će u sledećim poglavljima biti više reči.



Slika 8.4.2 Primeri različitih funkcija: a) višeznačna; b) neograničena; c) neograničena u određenom opsegu; d) neograničena u jednoj tački; e) funkcija sa prelomom; f) neprekidna funkcija.

8.4.2 Svojstvene funkcije i svojstvene vrednosti

Vratimo se sada stacionarnoj Šredingerovoj jednačini (8.4.17):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi .$$

Levu stranu ove jednačine možemo da shvatimo kao niz instrukcija za izvršenje određenih matematičkih operacija nad talasnom funkcijom Ψ. Treba, dakle, da se odrede drugi izvodi funkcije Ψ po koordinatama (Laplasov operator) i da se pomnože sa $-\hbar^2/(2m)$, a ovaj rezultat treba sabrati sa proizvodom talasne funkcije i potencijalne energije U. Desna strana Šredingerove jednačine je jednostavno proizvod talasne funkcije Ψ i nekog određenog broja (vrednosti energije E). Niz instrukcija s leve strane Šredingerove jednačine predstavlja kvantnomehanički operator ukupne energije i obično se obeležava sa H:

$$\hat{H} = (E)_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}(r) . \tag{8.4.22}$$

$\hat{U}$ je oznaka operatora potencijalne energije. Koristeći prethodnu jednačinu, vremenski nezavisnu Šredingerovu jednačinu napisaćemo na sledeći način:

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{8.4.23}$$

dok vremenski zavisna Šredingerova jednačina ima oblik:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{8.4.24}$$

Rešavanje jednačine (8.4.23) odnosno (8.4.24) sastoji se u nalaženju partikularnih rešenja Ψ_n koja zadovoljavju određene granične uslove. Takve funkcije Ψ_n nazivaju se **svojstvene funkcije** operatora H, a energija E naziva se **svojstvena vrednost** operatora energije. Sama Šredingerova jednačina predstavlja, dakle, u matematičkom smislu svojstveni problem operatora energije.

Skup svojstvenih vrednosti naziva se **spektar svojstvenih vrednosti**. On može da bude diskretan i kontinualan. Ako određenoj svojstvenoj vrednosti odgovara samo jedna svojstvena funkcija (pri tome treba da se ima na umu da se svojstvene funkcije koje se razlikuju samo za stalni činilac smatraju identičnim), ta svojstvena vrednost naziva se **nedegenerisanom**. Svojstvena vrednost, kojoj odgovaraju dve ili više linearno nezavisnih svojstvenih funkcija, je **degenerisana**.

Ako se sistem može nalaziti u stanjima koje opisujemo funkcijama $\psi_1, \psi_2....\psi_n$ koje su svojstvene funkcije istog operatora (pri istoj svojstvenoj vrednosti), onda se stanje sistema može opisati i funkcijom $\psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2+...$ koje je linearna kombinacija funkcija ψ_1, ψ_2. Takva funkcija, takođe, je svojstvena funkcija istog operatora. Linearnom kombinacijom talasnih funkcija izražavamo princip *superpozicije*.

Prema postulatu kvantne mehanike, dinamičkim promenljivim kao što su koordinata, impuls, moment impulsa, energija, pridružuju se, tako da uzajamno zadovoljavaju određene komutacione jednačine, kvantnomehanički operatori. Za svaki od ovih operatora mogu da se napišu jednačine svojstvenih vrednosti slične izrazu (8.4.23):

$$\hat{\Omega}\psi = \omega\psi \tag{8.4.25}$$

gde su ψ svojstvene funkcije operatora $\hat{\Omega}$, a ω njegove svojstvene vrednosti. Kako su dinamičke promenljive veličine koje, uopšte uzevši, mogu da se mere, svojstvene vrednosti ω moraju da budu realne. Kvantnomehaničke operatore prikazujemo (kao i u slučaju operatora energije) u tzv. koordinatnom predstavljanju (postoje i drukčija predstavljanja, npr. impulsno). U ovom predstavljanju koordinatama položaja *x, y* i *z* pridružuju se operatori položaja *x, y* i *z* koje jednostavno tumačimo kao „pomnožiti sa *x*". Komponentama impulsa p_x, p_y, p_z pridružuju se operatori:

$$\hat{p}_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}. \tag{8.4.26}$$

Operator impulsa možemo formalno da odredimo pomoću poznatog operatora energije H, jednačina (8.4.22). Kada je potencijalna energija U jednaka nuli, energija E je samo kinetička (T):

$$p_x^2 = 2mE; \ \hat{p}_x^2 = 2m(\hat{T}) = 2m\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right] \Rightarrow \hat{p}_x = \pm\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}.$$

Od dve moguće vrednosti za $\hat{p}_x$ uzima se ona sa pozitivnim znakom.

Kvantnomehanički operatori drugih važnih dinamičkih promenljivih dobijaju se tako što se ove veličine izraze preko koordinata i impulsa, koji se zatim zamene odgovarajućim operatorima.

Tako se, momentu impulsa $\vec{l}$ pridružuje operator momenta impulsa $\vec{l}_{op}$:

$$\vec{l} = \vec{r}\times\vec{p} = \begin{bmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{bmatrix} \rightarrow \vec{l}_{op} = \frac{\hbar}{i}\begin{bmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \tag{8.4.27}$$

a komponentama momenta impulsa l_x, l_y i l_z pridružuju se operatori:

$$\begin{aligned} l_x &= yp_z - zp_y \rightarrow \hat{l}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ l_y &= zp_x - xp_z \rightarrow \hat{l}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ l_z &= xp_y - yp_x \rightarrow \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \end{aligned} \tag{8.4.28}$$

Postulatom kvantne mehanike definiše se srednja vrednost ili očekivana vrednost operatora [videti relacije (D-8.4.15) i (D-8.4.18)], kao i disperzija rezultata merenja neke dinamičke promenljive sistema, koju ćemo označiti sa Ω kada se njeno merenje ponovi mnogo puta. Pomnožimo prvo (8.4.25) funkcijom ψ^* (koja je konjugovano kompleksna funkciji ψ) i integralimo po čitavom prostoru:

$$\omega = \frac{\int \psi^* \hat{\Omega}\psi dV}{\int \psi^* \psi dV}. \tag{8.4.29}$$

Prema jednačini (8.4.29) se kao rezultat preciznog merenja dinamičke promenljive Ω kada je ψ svojstvena funkcija operatora Ω dobija vrednost ω. Kada je, međutim, sistem u stanju ψ, pri čemu je ψ dobijena npr. rešavanjem svojstvenog problema (8.4.23) ali nije svojstvena funkcija operatora Ω, kvantnomehaničkim postulatom se definiše očekivana vrednost operatora (ili srednja vrednost) $\langle\Omega\rangle$:

$$\langle\Omega\rangle = \frac{\int \psi^* \hat{\Omega}\psi dV}{\int \psi^* \psi dV}. \tag{8.4.30}$$

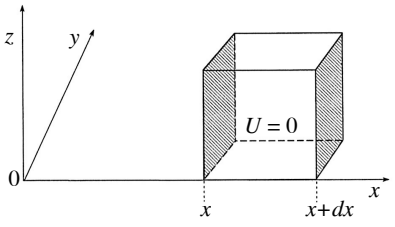
Kada je npr. operator Ω jednak operatoru impulsa tada se izračunavanjem desne strane jednačine (8.4.30) dobija srednja vrednost impulsa čestice za stanje ψ. Disperzija rezultata merenja [videti i (D-8.4.21)] dobija se iz relacije:

$$\langle (\Omega - \langle \Omega \rangle)^2 \rangle = \frac{\int \psi^* (\hat{\Omega} - \langle \Omega \rangle)^2 \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}. \qquad (8.4.31)$$

8.4.3 Struja gustine verovatnoće

DODATAK 8.4

D-8.4.3 Jednačina kontinuiteta



Slika D-8.4.1 Uz fluks gustine verovatnoće.

Pokazaćemo u tekstu koji sledi da funkcija gustine verovatnoće zadovoljava neku vrstu jednačine kontinuiteta koja nam je poznata iz mehanike fluida. Podsetićemo se sada u pojednostavljenom vidu o čemu je tu reč.

Uzmimo zapreminu u obliku kocke. Neka su ivice kocke postavljene duž koordinantih osa, *x, y* i *z*, Slika D-8.4.1 Pustimo da u ovu zapreminu utiče tečnost i to paralelno *x*-osi. Gustinu struje (fluksa) tečnosti označićemo sa:

$$\vec{s}(x, y, z) = s_x(x, y, z)\vec{i}\ .$$

Ako je kocka dovoljno mala, tada $s_x(x, y, z)$ može da se smatra stalnim duž cele stranice kocke. Količina tečnosti koja utiče kroz levu stranu kocke, u jedinici vremena je:

$$s_x(x, y, z)\ dy\ dz\,. \qquad (D\text{-}8.4.24)$$

Količina tečnosti koja ističe kroz desnu stranu kocke je:

$$-s_x(x + dx, y, z)\ dy\ dz \qquad (D\text{-}8.4.25)$$

ili približno:

$$-s_x(x + dx,y,z)\ dy\ dz = -s_x(x,y,z)\ dy\ dz - \frac{\partial s_x(x,y,z)}{\partial x} dx\ dy\ dz. \qquad (D\text{-}8.4.25a)$$

Promena količine tečnosti unutar zapremine jednaka je algebarskom zbiru izraza (D-8.4.24) i (D-8.4.25a):

$$s_x(x)\ dy\ dz - s_x(x)\ dy\ dz - \frac{\partial s_x(x,y,z)}{\partial x} dx\ dy\ dz = -\frac{\partial s_x(x, y, z)}{\partial x} dx\ dy\ dz. \qquad (D\text{-}8.4.26)$$

Ako bismo posmatrali proticanje tečnosti u pravcu *y*-ose [$\vec{s}(x, y, z) = s_y(x, y, z)\vec{j}$ odnosno *z*-ose $\vec{s}(x, y, z) = s_z(x, y, z)\vec{k}$] promena količine tečnosti iznosila bi:

$-\partial s_y/\partial$ *dx dy dz,* odnosno $-\partial s_z/\partial z$, *dx dy dz,* saglasno izrazu (D-8.4.26). U opštem slučaju gustinu struje tečnosti koja protiče u proizvoljnom pravcu prikazaćemo vekto-

rom: $\vec{s}(x, y, z) = s_x(x, y, z)\vec{i} + s_y(x, y, z)\vec{j} + s_z(x, y, z)\vec{k}$, pa bi u tom slučaju promena količine tečnosti unutar zapremine iznosila $-\nabla \cdot \vec{s}$, gde je ∇ vektorski operator:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}\cdot$$

Ako se ukupna količina tečnosti održava (a to je slučaj kada unutar zapremine nema ni izvora ni ponora), promena količine tečnosti koja nastaje, jednačina (D-8.4.26) mora da se nadoknadi promenom gustine ρ:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz \qquad \text{(D-8.4.27)}$$

što ćemo napisati na sledeći način:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial s_x}{\partial x} = 0 \qquad \text{(D-8.4.28)}$$

za slučaj prostiranja fluida u pravu x-ose i:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{s} = 0 \qquad \text{(D-8.4.28a)}$$

u opštem slučaju. Jednačine (D-8.4.28) i (D-8.4.28a) predstavljaju jednačine kontinuiteta.

Pomoću funkcije gustine verovatnoće $\Psi^*\Psi$ može da se odredi verovatnoća nalaženja čestice u nekoj zapremini V. Nekada nas, međutim, zanima broj čestica koje prolaze kroz neku površinu u jedinici vremena ili fluks čestica. Naslućujemo da bi određena kombinacija funkcija gustine verovatnoće mogla da se poveže i sa fluksom čestica. U proračunu koji je izveo Maks Born može da se pokaže da funkcija $\Psi\Psi^*$ ostaje stalna i da eventualni višak $\Psi\Psi^*$ koji nastaje u nekom trenutku i na nekom mestu mora da se nadoknadi manjkom $\Psi\Psi^*$ na nekom drugom mestu. Pokazaćemo sada da funkcija gustine verovatnoće zadovoljava jednačinu po obliku analognu jednačini kontinuiteta [videti jednačinu (D-8.4.28) i (D-8.4.28a)] koja nam je poznata iz mehanike fluida.

Izvešćemo sada ovu jednačinu. Napisaćemo prvo vremenski zavisnu Šredingerovu jednačinu (8.4.18):

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi \qquad (8.4.32)$$

i njoj odgovarajuću jednačinu čije je rešenje konjugovano kompleksna funkcija Ψ^*:

$$+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + U\Psi^*\cdot \qquad (8.4.33)$$

Prvu jednačinu (8.4.32) ćemo pomnožiti sa $-\Psi^*$, a drugu (8.4.33) sa Ψ, a zatim ih sabrati:

$$+\frac{\hbar}{i}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}(\Psi^*\Delta\Psi-\Psi\Delta\Psi^*)$$

ili u jednodimenzionom slučaju:

$$+\frac{\hbar}{i}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right)\cdot$$

Prethodni izraz možemo da napišemo i u obliku:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)\right] = 0\cdot \tag{8.4.34}$$

Sada možemo da uporedimo jednačinu (8.4.34) sa jednačinom kontinuiteta (D-8.4.28). Jednačina (8.4.34) ima istu strukturu kao hidrodinamička jednačina, s tim što ulogu gustine ρ ima funkcija $\Psi^*\Psi$ dok izraz:

$$S = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) \tag{8.4.35}$$

predstavlja **struju gustine** verovatnoće. Ovom veličinom označavamo verovatnoću da čestica u jednoj sekundi prođe kroz površinu u smeru pozitivne normale na tu površinu. U opštijem, trodimenzionom slučaju, jednačina održanja (8.4.34) može da se napiše i u sledećem obliku:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)+\nabla\cdot\vec{S} = 0 \tag{8.4.36}$$

pri čemu bi sada $\vec{S}$ predstavljao vektor struje gustine verovatnoće:

$$\vec{S} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)\cdot \tag{8.4.37}$$

Ako se izraz (8.4.36) integrali po nekoj zapremini *V*, dobija se:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V\Psi^*\Psi\ dV = -\int_V\nabla\vec{S}\ dV = -\oint_A\vec{S}\cdot d\vec{A} \tag{8.4.38}$$

gde je $d\vec{A}$ površinski element koji je jednak veličini površine dA, a usmeren je isto kao i pozitivna normala na tu površinu. Dakle, integral vektora $\vec{S}$ po površini A daje verovatnoću prolaska čestice kroz tu površinu u jedinici vremena. Desni deo jed-

načine (8.4.38) dobijen je primenom Stoksove (George Stokes, 1819-1903, engleski fizičar i matematičar) jednačine pomoću koje trostruki integral po zapremini V može da se zameni površinskim integralom po zatvorenoj površini koja obavija zapreminu V.

Integral jednačine (8.4.34) između koordinata x_1 i x_2, glasi:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\int_{x_1}^{x_2}(\Psi^*\Psi)dx\right] = \frac{i\hbar}{2m}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)\right]dx = S(x_1)-S(x_2)\cdot \quad (8.4.39)$$

Kako smo formalno pokazali ranije, jednačina (8.1.29), kretanje čestice u pravcu x-ose sa impulsom p (takođe u pravcu x-ose) i amplitudom Ψ_0, može da se prikaže De Broljijevim talasom:

$$\Psi = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}.$$

Napišimo sada konjugovano kompleksnu funkciju ovoj funkciji:

$$\Psi^* = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et-px)}.$$

Izračunajmo zatim struju gustine verovatnoće:

$$\Psi^*\Psi = \Psi_0^2;\quad \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}p\Psi^*\Psi;\quad \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} = -\frac{i}{\hbar}p\Psi^*\Psi \Rightarrow$$

$$S = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) = \frac{p}{m}\Psi_0^2 = \upsilon\Psi_0^2\cdot \quad (8.4.40)$$

Jednačinom (8.4.40) pokazali smo to da struja gustine verovatnoće ili verovatnoća da čestica prođe kroz neku površinu zavisi i od brzine kretanja čestice, što se moglo i očekivati. U sledećem poglavlju, pri određivanju koeficijenata propustljivosti različitih barijera vratićemo se ponovo na izraz (8.4.39) odnosno na struju funkcije gustine verovatnoće.

8.5 STACIONARNA ŠREDINGEROVA JEDNAČINA

DODATAK 8.5

D-8.5.1 Dirakova delta funkcija

δ (delta) funkciju (Dodatak D-8.2), uveo je P. Dirak (Paul Adrien Maurice Dirac, 1902-1984, bitno doprineo razvoju kvantne mehanike i kvantne elektrodinamike, podelio sa E. Šredingerom Nobelovu nagradu za fiziku 1933). Delta (δ) funkcija definiše se kao:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases} \tag{D-8.5.1}$$

i:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1. \tag{D-8.5.2}$$

Jedno od najvažnijih svojstava δ funkcije, koje, naravno, matematički može da se dokaže, je:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x)dx = f(0). \tag{D-8.5.3}$$

Prethodni izraz može da se napiše u obliku:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)f(x)dx = f(a) \tag{D-8.5.4}$$

Podsetimo se na to da se svaka funkcija $f(x)$ može razviti u Furijeov red:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k)e^{ikx}dk \tag{D-8.5.5}$$

dok se koeficijenti razvoja dobijaju iz jednačine:

$$a(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-ikx}dx \tag{D-8.5.6}$$

δ-funkcija, takođe, može da se razvije u Furijeov red:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}dk \tag{D-8.5.7}$$

a koeficijent *a(k)* je:

$$a(k) = \frac{1}{2\pi}. \tag{D-8.5.8}$$

8.5.1 Mlaz elektrona

Posmatrajmo mlaz elektrona čija je kinetička energija E i koji se kreće brzinom $\upsilon(=\sqrt{2E/m})$ u pravcu ose x. U ovom slučaju potencijalna energija U čestice (elektrona) jednaka je nuli, pa stacionarna Šredingerova jednačina glasi:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0. \tag{8.5.1}$$

Jednačina (8.5.1) je standardna diferencijalna jednačina drugog reda čije rešenje tražimo u obliku $\psi = e^{rx}$. Zamenjivanjem pretpostavljenog rešenja i njegovog drugog izvoda u (8.5.1), dobija se karakteristična kvadratna jednačina:

$$r^2 + \frac{2m}{\hbar^2}E = 0$$

koja ima dva kompleksna korena:

$$r_{1/2} = \pm\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE} = \pm ik; \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Pošto se elektron slobodno kreće, sa impulsom $\vec{p}$ u pravcu x-ose, njegova energija je kinetička, pa važi:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}.$$

Impuls elektrona p u navedenoj jednačini zamenili smo (prema De Broljijevoj jednačini) količnikom h/λ gde je λ De Broljijeva talasna dužina pridružena elektronu koji se kreće brzinom υ. Sada rešenja karakteristične jednačine dobijaju oblik:

$$r_{1/2} = \pm\frac{2\pi i}{\lambda} = \pm\frac{i}{\hbar}p$$

pa diferencijalna jednačina (8.5.1) ima dva rešenja, ψ_1 i ψ_2:

$$\psi_1 = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x} = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} = Ae^{\frac{2\pi i}{\lambda}x}; \qquad \psi_2 = Be^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x} = Be^{-\frac{i}{\hbar}px} = Be^{\frac{-2\pi i}{\lambda}x}. \tag{8.5.2}$$

A i B su konstante normiranja. Funkcije ψ_1 i ψ_2 su neprekidne i konačne u celom opsegu za bilo koju, pozitivnu vrednost energije E. U ovom slučaju spektar svojstvenih vrednosti energije je kontinualan. Kako postoje dva rešenja Šredingerove jednačine za istu vrednost energije, stanje može da se smatra i dvostruko degenerisanim.

Da bismo razumeli poreklo ove degeneracije, napisaćemo operator impulsa, jednačina (8.4.26) i odredićemo rezultat njegovog delovanja na funkcije ψ_1 i ψ_2:

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}. \tag{8.5.3}$$

U jednačinama koje slede umesto p_x pisaćemo samo p, podrazumevajući da je reč o impulsu čestice koja se kreće u pravcu x-ose. Primenimo prvo operator impulsa na funkciju ψ_1:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_1 = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(Ae^{\frac{i}{\hbar}px}\right) = p\psi_1 \tag{8.5.4}$$

a zatim na talas ψ_2:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_2 = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(Be^{-\frac{i}{\hbar}px}\right) = -p\psi_2. \tag{8.5.5}$$

Vidimo da jednačine (8.5.4) i (8.5.5) imaju oblik jednačine svojstvenih vrednosti jer se dejstvom operatora na funkciju dobija ista ta funkcija pomnožena nekom konstantom. Možemo, takođe, da zaključimo da su svojstvene funkcije operatora energije istovremeno i svojstvene funkcije operatora impulsa, ali tako da svojstvenoj funkciji ψ_1 odgovara svojstvena vrednost $+p$, a svojstvenoj funkciji ψ_2 odgovara svojstvena vrednost $-p$. To znači da dve talasne funkcije ψ_1 i ψ_2 odgovaraju stanjima čestice istog intenziteta impulsa ali suprotnog smera kretanja, Slika 8.5.1. To dalje znači da se pomoću znaka u eksponentu talasne funkcije određuje smer kretanja čestice duž određene ose.

Posmatrajmo sada funkciju ψ koja je linearna kombinacija funkcija ψ_1 i ψ_2:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} + Be^{-\frac{i}{\hbar}px} \tag{8.5.6}$$

sa ciljem da utvrdimo da li je i funkcija ψ svojstvena funkcija operatora impulsa. Rešenje $\psi(x)$, jednačina (8.5.6.) uz pomoć Ojlerove formule:

$$e^{\pm i\rho} = \cos\rho \pm i\sin\rho$$

može da se napiše u trigonometrijskom obliku:

$$\psi(x) = C\cos kx + D\sin kx; \qquad k = \frac{i}{\hbar}p \tag{8.5.7}$$

pri čemu su konsantne C i D povezane sa A i B iz jednačine (8.5.1) sledećim vezama:

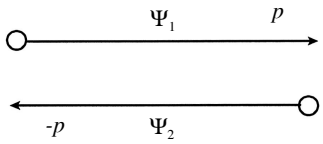
$$C = A + B; \qquad D = i(A - B).$$

Neka je D u jednačini (8.5.8) jednako 0, što znači da je $\psi = C\cos kx$. Ispitaćemo sada dejstvo operatora impulsa na ovu funkciju:

$$\hat{p}\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(C\cos kx) = -\frac{k\hbar}{i}C\sin kx. \tag{8.5.8}$$

Poslednja jednačina nema oblik jednačine svojstvenih vrednosti jer se dejstvom operatora **ne** dobija ista ta funkcija (pomnožena nekim činiocem), pa ovakva funkcija nije svojstvena funkcija operatora impulsa, te, prema tome, ne predstavlja određeno stanje čestice sa određenim impulsom p. Pokušajmo da rastumačimo i zašto. Napisaćemo funkciju cos kx kao zbir dva člana:

$$\psi = C\cos kx = \frac{1}{2}Ce^{ikx} + \frac{1}{2}Ce^{-ikx}. \tag{8.5.9}$$



Slika 8.5.1 Talasne funkcije kod linearnog kretanja.

Funkcija ψ izražena jednačinom (8.5.9) predstavlja kombinaciju ili bolje rečeno slaganje (superpoziciju) dva stanja. Jedno stanje odgovara kretanju čestice udesno, a drugo predstavlja kretanje čestice ulevo.

Podvucimo da se kod funkcija sa kontinualnim spektrom svojstvenih vrednosti kao u ovom slučaju dobija:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \cdot \psi^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} Ae^{\frac{i}{\hbar}p} \cdot Ae^{-\frac{i}{\hbar}px} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 dx \to \infty \tag{8.5.10}$$

zbog čega talasna funkcija mora da se normira na poseban način. U ovakvim slučajevima obično se vrši normiranje na tzv. δ-funkciju. Može da se zapazi da integral proizvoda talasnih funkcija ima oblik δ-funkcije razvijene u Furijeov red:

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p)x} dx \propto \delta(p-p) \propto \delta(0). \tag{8.5.11}$$

Razvoj δ funkcije razvijene u Furijeov red ima oblik:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}dk \tag{8.5.12}$$

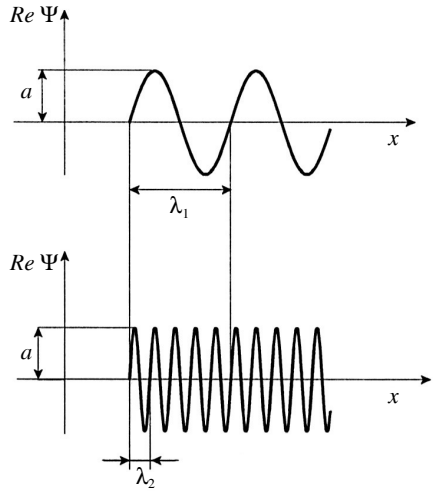
pa se upoređivanjem jednačina (8.5.11) i (8.5.12) dolazi do vrednosti konstante normiranja A:

$$A^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} = \frac{1}{h} \tag{8.5.13}$$

a talasna funkcija (odnosno svojstvena funkcija operatora impulsa) ψ konačno ima oblik:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{h}} e^{\frac{i}{\hbar}px}. \tag{8.5.14}$$

Na Slici 8.5.2 prikazana je zavisnost realnog dela funkcije ψ od koordinate x, jednačina (8.5.2). Period ove oscilatorne funkcije jednak je De Broljijevoj talasnoj dužini koja je pridružena elektronu, $\lambda = (h/p)$. Na Slici 8.5.2 prikazana su dva slučaja: u prvom, elektroni se kreću sa impulsom p, a u drugom slučaju njihov impuls je pet puta veći u odnosu na prethodni.



Slika 8.5.2 Realni deo rešenja Šredingerove jednačine za mlaz elektrona koji se slobodno kreće duž x-ose: (gore) mlaz sa impulsom p; (dole) mlaz sa impulsom $5p$.

8.5.2 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: energija čestice E je veća od potencijalne energije barijere U, $E > U$

Posmatrajmo česticu, na primer, elektron koji, krećući se u pozitivnom smeru x-ose kroz oblast I, nailazi u tački $x = 0$ na oblast II, Slika 8.5.3. U oblasti I ($x \leq 0$) potencijalna energija U čestice jednaka je nuli, pa je ukupna energija E čestice jednaka njenoj kinetičkoj energiji. U okolini tačke $x = 0$, pod dejstvom polja sile, potencijalna energija (ili potencijal) čestice se menja skokovito do neke stalne vred-

nosti U za $x \geq 0$. Slikovito rečeno, oblast II predstavlja potencijalnu barijeru (prepreku) za česticu. Kako ukupna energija mora da se održava (a ona je zbir kinetičke i potencijalne energije), sledi da u oblasti II čestica ima kinetičku energiju $T = E - U$. Izračunaćemo sada verovatnoću da čestica koja dolazi s leve strane *(U = 0)* prođe kroz potencijalnu barijeru, odnosno da se odbije od nje i da se vrati nazad. Napisaćemo stacionarne Šredingerove jednačine za oblasti I i II:

$$\text{I:} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\psi = 0; \qquad -\infty < x \leq 0 \tag{8.5.15}$$

$$\text{II:} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U)\psi = 0; \qquad 0 \leq x < +\infty. \tag{8.5.16}$$

Kao i u prethodnom primeru za svaku od diferencijalnih jednačina (8.5.15) i (8.5.16) dobijamo po dva rešenja. Kao rešenje uzimamo, međutim, njihovu linearnu kombinaciju koja je, saglasno svojstvu slaganja (superpozicije) koje ove diferencijalne jednačine imaju, takođe rešenje:

$$\text{I:} \quad \psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \quad -\infty < x \leq 0, \qquad k_1 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE} \tag{8.5.17}$$

$$\text{II:} \quad \psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}; \quad 0 \leq x < \infty, k_2 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2m(E - U)}. \tag{8.5.18}$$

U jednačinama (8.5.17) i (8.5.18) A_1, B_1, A_2 i B_2 su konstante a i imaginarna jedinica. Izraz:

$$A_1 e^{ik_1 x}$$

predstavlja tzv. upadni talas ψ_u ili talas koji se kreće u pozitivnom smeru x-ose u oblasti I, pre nailaska na barijeru. Talas reflektovan barijerom ψ_r, kreće se u negativnom smeru x-ose, pa njemu odgovara drugi član jednačine (8.5.17):

$$B_1 e^{-ik_1 x}.$$

Izraz:

$$A_2 e^{ik_2 x}$$

predstavlja talas koji se kreće u pozitivnom smeru x-ose u oblasti II i to je talas koji je prošao kroz barijeru. Talas koji bi se u oblasti II kretao zdesna nalevo prikazali bismo jednačinom:

$$B_2 e^{-ik_2 x}.$$

Ovaj talas nema fizičkog smisla i zato je konstanta $B_2 = 0$. Prema tome, talasna funkcija ψ_2 iz (8.5.18) postaje:

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x}. \tag{8.5.19}$$

Koristeći sličnost iz optike možemo da kažemo da se upadni talas pri nailasku na granicu dveju sredina deli na reflektovani i propušteni talas. Izračunaćemo sada koeficijente propustljivosti T i refleksije R. Koeficijent propustljivosti predstavlja deo ukupnog broja čestica koji prolazi u oblast II, dok koeficijent refleksije predstavlja deo čestica koje barijera odbija unazad. Zbir koeficijenta propustljivosti i refleksije mora da bude jednak jedinici. U jednom stacionarnom stanju, struja gustine verovatnoće mora da bude stalna jednačina (8.4.35). Zato, logično, i sledi da struja gustine verovatnoće u sredini I, S_{I}, mora da bude jednaka struji gustine verovatnoće u sredini II, S_{II}. Izračunaćemo sada, na osnovu jednačine (8.4.35), struju gustine verovatnoće u sredini I i u sredini II.

$$S_1(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1^* \frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \psi_1 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial x}\right). \tag{8.5.20}$$

Uzimajući u obzir da je funkcija ψ_1 određena jednačinom (8.5.17), a da je njoj konjugovana funkcija:

$$\psi_1^*(x) = A_1 e^{-ik_1 x} + B_1 e^{ik_1 x}$$

dobija se za struju gustine verovatnoće u svakoj tački x sredine, I, izraz:

$$S_1 = \frac{\hbar k_1}{m}(A_1^2 - B_1^2) = \upsilon_1 A_1^2 - \upsilon_1 B_1^2. \tag{8.5.21}$$

Kako je funkcija ψ_2 data izrazom (8.5.19), a njoj konjugovana funkcija je:

$$\psi_2^*(x) = A_2 e^{-ik_2 x}$$

struja gustine verovatnoće u svakoj tački sredine II iznosi:

$$S_{II} = \frac{\hbar k_2}{m} A_2^2 = \upsilon_2 A_2^2 \left(k_2 = \frac{m\upsilon_2}{\hbar}\right). \tag{8.5.22}$$

U stacionarnom stanju je $S_1 = S_{\text{II}}$, pa se dobija:

$$\upsilon_1 A_1^2 - \upsilon_1 B_1^2 = \upsilon_2 A_2^2 \tag{8.5.23}$$

υ_1 i υ_2 su brzine kretanja čestica u sredinama I i II. Kada jednačinu (8.5.23) podelimo proizvodom $\upsilon_1 A^2{}_1$ koji označava upadnu struju gustine verovatnoće, dobijamo:

$$\frac{B_1^2}{A_1^2} + \frac{\upsilon_2 A_2^2}{\upsilon_1 A_1^2} = R + T = 1 \Rightarrow T = \frac{\upsilon_2 A_2^2}{\upsilon_1 A_1^2}; \quad R = \frac{B_1^2}{A_1^2}. \tag{8.5.24}$$

Kako i sledi iz jednačine (8.5.24) koeficijent propustljivosti zavisi od odnosa brzina čestice u dvema sredinama kroz koje se prostiru upadni i propušteni talas. Upadni i reflektovani talas prostiru se samo kroz sredinu I, pa u koeficijentu refleksije zavisnost od brzine ne postoji. Prema tome, da bismo izračunali udeo propuštenih odnosno reflektovanih čestica, treba da odredimo količnik konstanti B_1 i A_1 odnosno A_2 i A_1. Ove konstante odredićemo iz uslova neprekidnosti talasne funkcije i njenih izvoda na granicama intervala:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \qquad \psi_1'(0) = \psi_2'(0). \tag{8.5.25}$$

Iz (8.5.17) i (8.5.19) odmah dobijamo:

$$\psi_1(0) = A_1 + B_1$$
$$\psi_2(0) = A_2.$$

Da bismo iskoristili drugi deo uslova (8.5.25) treba da odredimo izvode talasnih funkcija:

$$\psi_1'(x) = ik_1A_1e^{ik_1x} - ik_1B_1e^{-ik_1x}$$
$$\psi_2'(x) = ik_2A_2e^{ik_2x}.$$

Na granici oblasti I i II:

$$\psi_1'(0) = ik_1A_1 - ik_1B_1$$
$$\psi_2'(0) = ik_2A_2.$$

Uslovi (8.5.25) dobijaju sada svoj posebni oblik:

$$A_1 + B_1 = A_2 \tag{8.5.26}$$
$$ik_1A_1 - ik_1B_1 = ik_2A_2. \tag{8.5.27}$$

Eliminišući A_2 iz (8.5.26) i (8.5.27), nalazimo vezu između koeficijenata B_1 i A_1:

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A_1.$$

Kako smo ranije istakli, odnos koeficijenata B_1 i A_1 dignut na kvadrat daje udeo čestica koje barijera reflektuje, što je koeficijent refleksije. Kako se vidi $(B_1/A_1)^2$, jednako je odnosu kvadrata modula reflektovanog i upadnog talasa:

$$R = \frac{\psi_r\psi_r^*}{\psi_u\psi_u^*} = \frac{B_1e^{ik_1x}B_1e^{-ik_1x}}{A_1e^{-ik_1x}A_1e^{ik_1x}} =$$
$$= \left(\frac{B_1}{A_1}\right)^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U/E}}{1 + \sqrt{1 - U/E}}\right)^2. \tag{8.5.28}$$

R se naziva koeficijent refleksije. Koeficijent propustljivosti T koji daje udeo čestica koje prolaze kroz barijeru je:

$$T = 1 - R = 4\frac{k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 4\frac{\sqrt{1 - U/E}}{(1 + \sqrt{1 - U/E})^2}. \qquad (8.5.29)$$

Na osnovu jednačine (8.5.28) i (8.5.29) možemo da izačunamo udeo čestica sa energijom E koje bivaju reflektovane barijerom, odnosno čestica koje prolaze kroz barijeru energije U. Za različite vrednosti odnosa U/E izračunati su koeficijenti refleksije R i koeficijenti propustljivosti T, a ovi rezultati prikazani su u Tabeli 8.5.1.

Tabela 8.5.1. Koeficijent refleksije i propustljivosti za različite vrednosti E/U, gde je E energija čestice, a U potencijalna energija barijere.

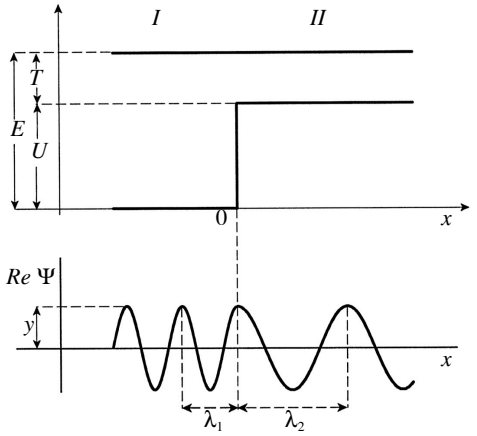
U/E	R	T
0,1	0,0007	0,9993
4	0,0161	0,9839
6	0,0507	0,9493
0,8	0,1459	0,8541
0,9	0,2700	0,7300
0,95	0,4026	0,5974
0,99	0,8182	0,1818

Rezultati koji slede iz (8.5.28) i (8.5.29) bitno se razlikuju od onih koje očekujemo na osnovu zakona klasične fizike. Klasična čestica koja ima energiju veću od visine barijere, sigurno bi prošla u oblast II, što označavamo sa $T = 1$ i $R = 0$. Iz prethodnih jednačina, međutim, vidimo da uvek postoji određena verovatnoća da se čestica reflektuje – osim u slučaju da visina barijere $U \to 0$ ili kada bi čestica imala beskonačno veliku energiju, $E \to \infty$, $R \to 0$ odnosno $T \to 1$.

Na Slici 8.5.3 prikazan je realni deo funkcije $\psi(x)$ koja je dobijena kao rešenje Šredingerovih jednačina (8.5.15) i (8.5.16). Kao što se vidi, barijera ne utiče na amplitudu funkcije. Kako čestica u sredinama I i II ima različite kinetičke energije E i $E - U$, redom, to se i De Broljijeve talasne dužine čestice u sredinama I i II razlikuju. Tako je: $\lambda_I < \lambda_{II}$ jer je $p_I > p_{II}$ pošto iz De Broljijeve jednačine sledi da je $\lambda_I = h/p_I = h/\sqrt{2mE}$ a $\lambda_{II} = h/\sqrt{2m(E-U)}$.

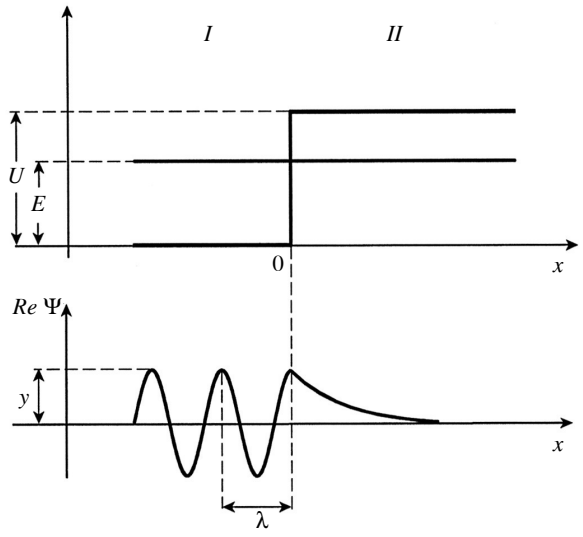
8.5.3 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: energija čestice E manja je od potencijalne energije barijere U, $E < U$

Posmatrajmo kretanje čestice (elektrona) u pozitivnom smeru x-ose, pri čemu čestica iz oblasti I nailazi u tački $x = 0$ na oblast II, Slika 8.5.4. U oblasti I ($x \le 0$) potencijalna energija čestice jednaka je nuli, pa je energija E čestice po svom obliku kinetička. U oblasti II ($x \ge 0$) potencijalna energija čestice menja se skokovito do neke stalne vrednosti U, pri čemu je sada $U > E$. Klasična mehanika ne predviđa mogućnost da čestica prodre u oblast II sleva nadesno. Naime, jednakost ukupnih



Slika 8.5.3 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru – ukupna energija čestice E veća je od visine barijere U, $E > U$. Pošto se impuls čestice smanjio usled prolaska kroz barijeru, smanjila se učestanost odnosno povećao se period talasne funkcije, pri čemu je amplituda y ostala ista.

energija čestice u oblasti I i u oblasti II mogla bi u ovom slučaju da bude zadovoljena samo kada bi bile moguće negativne vrednosti kinetičkih energija [$E = U + (-T_{II})$]. Kako je ovo nemoguće, nemoguće je i da čestica prodre kroz potencijalnu barijeru. Ispitaćemo sada šta predviđa kvantna mehanika u ovom slučaju.



Slika 8.5.4 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru; energija čestice E manja je od potencijalne energije barijere U. Barijera „prigušuje" talas, pa se amplituda talasa y asimptotski približava nuli.

Napisaćemo Šredingerove jednačine koje se odnose na stanje čestice u oblasti I i II:

$$\text{I:} \quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\psi_1 = 0\,; \qquad -\infty < x \le 0 \tag{8.5.30}$$

$$\text{II:} \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi_2 = 0; \qquad 0 \le x < +\infty. \tag{8.5.31}$$

Rešenja ovih jednačina su:

$$\text{I:} \quad \psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \quad -\infty < x \le 0, \quad k_1 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE} \tag{8.5.32}$$

$$\text{II:} \quad \psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}; \quad 0 \le x < \infty, \; k_2 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2m(U-E)}. \tag{8.5.33}$$

Kao i u prethodnom poglavlju sa $\psi_u = A_1 e^{ik_1 x}$ označićemo upadni talas, a sa $\psi_r = B_1 e^{-ik_1 x}$ reflektovani talas. Priroda rešenja u oblasti II sada je drukčija – kako je $U > E$, talasna funkcija za $x > 0$ nema oscilatorni već eksponencijalni oblik. Da bi funkcija ψ_2 bila konačna za sve vrednosti x-koordinate, moramo da izaberemo $A_2 = 0$ (inače bi $\psi_2 \to \infty$ kada $x \to \infty$). Prema tome, u oblasti II talasna funkcija ima eksponencijalno opadajući oblik:

$$\psi_2(x) = B_2 e^{-k_2 x}. \tag{8.5.34}$$

Koeficijente refleksije R i propustljivosti T nalazimo kao u slučaju kad je $U < E$:

$$\psi_1(0) = A_1 + B_1$$

$$\psi_2(0) = B_2.$$

Izvodi funkcija ψ_1 i ψ_2 su:

$$\psi_1'(x) = ik_1 A_1 e^{ik_1 x} - ik_1 B_1 e^{-ik_1 x}; \; \psi_1'(0) = ik_1 A_1 - ik_1 B_1$$

$$\psi_2'(x) = -k_2 B_2 e^{-k_2 x}; \; \psi_2'(0) = -k_2 B_2.$$

Uslovi neprekidnosti talasne funkcije i njenih izvoda na granici oblasti I i II glase:

$$A_1 + B_1 = B_2$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = -k_2 B_2.$$

Uklanjanjem B_2 iz ovih jednačina nalazimo:

$$A_1(ik_1 + k_2) = B_1(ik_1 - k_2).$$

Koeficijent refleksije odredićemo, kao i ranije, iz jednačine:

$$R = \frac{\psi_{1r}\psi_{1r}^*}{\psi_{1u}\psi_{1u}^*} = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = \frac{B_1 B_1^*}{A_1 A_1^*} = \frac{ik_1 + k_2}{ik_1 - k_2}\frac{ik_1 - k_2}{ik_1 + k_2} = 1. \qquad (8.5.35)$$

Koeficijent propustljivosti T=1 – R=0. Ovakav rezultat mogao je odmah da se dobije i proračunom vrednosti struje gustine verovatnoće u sredini II pomoću jednačine (8.4.35). S obzirom na oblik funkcije ψ_2, jednačine (8.5.34), ovaj fluks mora da bude jednak nuli. Dobili smo rezultat koji se na prvi pogled uopšte ne razlikuje od klasičnog: čestica koja ima energiju E manju od visine potencijalne barijere, potpuno se reflektuje pri nailasku na barijeru. Pa ipak, postoji jedna bitna razlika. Gustina verovatnoće nalaženja čestice u oblasti II nije jednaka nuli, što znači da čestica može da se nađe i unutar oblasti koja je za nju, prema klasičnoj mehanici, nedostupna. Ako nađemo kvadrat modula funkcije ψ_2:

$$\psi_2\psi_2^* = B_2^2 e^{-2k_2 x} = B_2^2 e^{-\frac{4\pi}{h}\sqrt{2m(U-E)}x} \qquad (8.5.36)$$

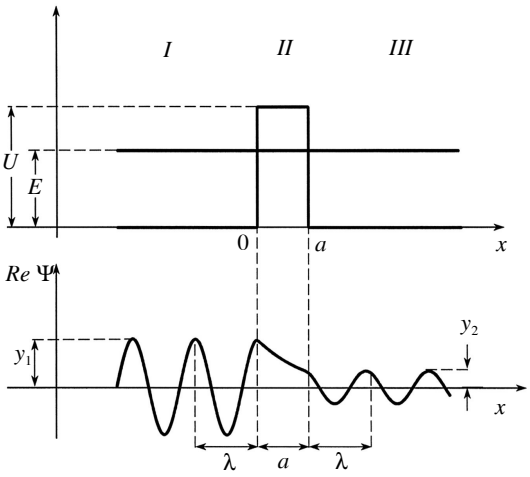
koji određuje verovatnoću nalaženja čestice na rastojanju x od granice oblasti I i II, vidimo da postoji određena, konačna verovatnoća da se čestica nađe i s desne strane barijere. Brzina opadanja funkcije gustine verovatnoće, jednačina (8.5.36) zavisi od mase čestice koja prodire kroz barijeru, kao i od razlike visine barijere i ukupne energije čestice. Obično se kao dubina prodiranja uzima rastojanje od granice oblasti I i II do tačke x na kojoj talasna funkcija ψ_2 [jednačina (8.5.34)] opadne na 1/e-ti deo njene vrednosti u tački $x = 0$. Rezultat (8.5.36) nije u suprotnosti sa rezultatom (8.5.35) – čestica se potpuno reflektuje ($T = 0$), ali ne obavezno na samoj granici oblasti I i II.

Na Slici 8.5.4 prikazan je realni deo talasne funkcije $\psi(x)$, koja je rešenje Šredingerove jednačine (8.5.30) i (8.5.31). U oblasti I talasna funkcija ima oscilatornu prirodu, dok u oblasti II eksponencijalno opada. Kažemo da barijera prigušuje talas.

8.5.4 Prolaz čestice sa energijom E kroz pravougaonu jednodimenzionu potencijalnu barijeru U konačne širine a, $E < U$

Neka na česticu u okolini tačke $x = 0$ deluje polje sile koje prouzrokuje promenu potencijala od vrednosti nula do neke konstantne vrednosti U. U okolini tačke a dolazi, opet zbog dejstva sile, do promene potencijala od vrednosti U do nule. Ogranično područje konstantnog pozitivnog potencijala, oblasti II ($0 \le x \le a$), Slika 8.5.5, naziva se potencijalna prepreka (barijera) konačne širine. U skladu sa tim, čestica koja se kreće sa energijom E u pozitivnom smeru x-ose, ima u oblastima I ($x \le 0$) i III ($x \ge a$) potencijalnu energiju nula, a u oblasti II ($0 \le x \le a$), njena potencijalna energija je U pri čemu je $U > E$. Šredingerove jednačine za oblast I, II i III glase:

$$\text{I: } \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi_1 = 0; \quad -\infty < x \le 0 \qquad (8.5.37)$$



Slika 8.5.5 Prolaz čestice koja ima energiju E kroz barijeru čija su potencijalna energija U i širina a, na osnovu rešenja (8.5.40) – (8.5.42). Amplituda talasne funkcije smanjuje se unutar barijere (prigušenje talasa), ali to ne utiče na period (frekvenciju) talasne funkcije u prostoru iza barijere.

$$\text{II: } \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi_2 = 0; \quad 0 \le x \le a \tag{8.5.38}$$

$$\text{III: } \frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi_3 = 0; \quad a \le x < +\infty. \tag{8.5.39}$$

Rešenja prethodnih jednačina su:

$$\text{I: } \psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \qquad -\infty < x \le 0, \quad k_1 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE} \tag{8.5.40}$$

$$\text{II: } \psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}; \quad 0 \le x \le a, \quad k_2 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2m(U-E)} \tag{8.5.41}$$

$$\text{III: } \psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x}; \qquad a \le x \le +\infty. \tag{8.5.42}$$

Član $B_3 e^{-ik_1 x}$, koji bi odgovarao kretanju čestice u oblasti III zdesna nalevo u (8.5.42) je izostavljen. Uslovi neprekidnosti funkcije i njenih izvoda na granicama intervala su:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$
$$\psi_2(a) = \psi_3(a); \quad \psi_2'(a) = \psi_3'(a).$$

Iz ovih uslova sledi:

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \tag{8.5.43}$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 \tag{8.5.44}$$

$$A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} \tag{8.5.45}$$

$$k_2A_2e^{k_2a}-k_2B_2e^{-k_2a} = ik_1A_3e^{ik_1a}. \tag{8.5.46}$$

Koeficijent propustljivosti, odnosno deo ukupnog broja čestica koji prođe kroz barijeru, jednak je odnosu kvadrata amplituda funkcije $\psi_3(x)$ i dela funkcije $\psi_1(x)$ koji opisuje kretanje sleva nadesno. Napomenimo da otpada zavisnost koeficijenta propustljivosti od brzine čestice jer su brzine čestica u sredinama I i III jednake:

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \tag{8.5.47}$$

Pomoću (8.5.43) – (8.5.46) izračunaćemo količnik A_3/A_1. Uvedimo sledeće smene:

$$\frac{A_3}{A_1} = w;\ \frac{A_2}{A_1} = y;\ \frac{B_1}{A_1} = z;\ \frac{B_2}{A_1} = t.$$

Sada sistem jednačina (8.5.43) – (8.5.46) ima oblik:

$$1 + z = y + t \tag{8.5.48}$$

$$ik_1 - ik_1z = k_2y - k_2t \tag{8.5.49}$$

$$ye^{k_2a} + te^{-k_2a} = we^{ik_1a} \tag{8.5.50}$$

$$k_2ye^{k_2a} - k_2te^{-k_2a} = ik_1we^{ik_1a}. \tag{8.5.51}$$

Ako jednačinu (8.5.48) pomnožimo sa ik_1 pa saberemo sa (8.5.49), dobijamo:

$$2ik_1 = y(k_2 + ik_1) + t(ik_1 - k_2). \tag{8.5.52}$$

Kada jednačinu (8.5.50) pomnožimo sa ik_1 i oduzmemo od (8.5.51) dobija se:

$$y(k_2 - ik_1)e^{k_2a} = t(ik_1 + k_2)e^{-k_2a}. \tag{8.5.53}$$

Uklanjanjem nepoznate t iz jednačina (8.5.52) i (8.5.53), dobijamo y:

$$y = \frac{2ik_1e^{-k_2a}(ik_1 + k_2)}{e^{-k_2a}(k_2 + ik_1)^2 - e^{k_2a}(k_2 - ik_1)^2}. \tag{8.5.54}$$

Sada i iz jednačina (8.5.50) i (8.5.51) uklonimo t da bismo dobili w u zavisnosti od y. S tim ciljem (8.5.50) množimo sa k_2 i dobijeni proizvod oduzimamo od (8.5.51):

$$w = \frac{2k_2e^{k_2a}}{(k_2 + ik_1)e^{ik_1a}}y.$$

Ako sada u gornju jednačinu uvrstimo izraz za y iz (8.5.54), dobijamo:

$$w = \frac{A_3}{A_1} = \frac{4ik_1k_2e^{-ik_1a}}{e^{-k_2a}(k_2+ik_1)^2 - e^{k_2a}(k_2-ik_1)^2}.$$

Uvodeći funkcije sinus hiperbolički i kosinus hiperbolički, definisane jednačinama:

$$sh(k_2a) = \frac{e^{k_2a} - e^{-k_2a}}{2};\ ch(k_2a) = \frac{e^{k_2a} + e^{-k_2a}}{2}$$

možemo w da predstavimo u obliku:

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2ik_1k_2e^{-ik_1a}}{(k_1^2 - k_2^2)sh(k_2a) + 2ik_1k_2ch(k_2a)}. \tag{8.5.55}$$

Izraz konjugovan ovome je:

$$\left(\frac{A_3}{A_1}\right)^* = \frac{-2ik_1k_2e^{ik_1a}}{(k_1^2 - k_2^2)sh(k_2a) - 2ik_1k_2ch(k_2a)}. \tag{8.5.56}$$

Koeficijent propustljivosti jednak je proizvodu jednačina (8.5.55) i (8.5.56):

$$\left(\frac{A_3}{A_1}\right)\left(\frac{A_3}{A_1}\right)^* = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2\, sh^2(k_2a) + 4k_1^2k_2^2ch^2(k_2a)}.$$

Kako je:

$$ch^2x - sh^2x = 1$$

konačno se dobija:

$$T = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2\, sh^2(k_2a) + 4k_1^2k_2^2}. \tag{8.5.57}$$

Ovaz izraz je dosta složen i nepogodan za analizu. Možemo da ga znatno uprostimo ako se koristimo činjenicom da je u najvećem broju slučajeva:

$$sh(k_2a) \approx \frac{1}{2}e^{k_2a}.$$

Pokažimo ovo na jednom tipičnom primeru. Neka je čestica koju posmatramo elektron, $E - U = 150eV$, dok je $a = 10^{-10}$ m (0,1 nm). Tada je:

$$k_2a = \frac{\sqrt{8\pi^2m(U-E)}}{h}a = \frac{\sqrt{8 \cdot 8{,}314^2 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 150 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}}}{6{,}6 \cdot 10^{-34}}10^{-10} = 6{,}28;$$

$$sh(6,28) = \frac{e^{6,28} - e^{-6,28}}{2} = 266,893; \quad \frac{e^{k_2 a}}{2} = 266,894.$$

Ako sada $\mathrm{sh}(k_2 a)$ zamenimo sa $e^{(k_2 a)}/2$, dobijamo:

$$T = \frac{4k_1^{\,2}k_2^{\,2}}{\frac{1}{4}(k_1^{\,2} + k_2^{\,2})^2 e^{2k_2 a} + 4k_1^{\,2}k_2^{\,2}} = \frac{4}{\frac{1}{4}\left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1}\right)^2 e^{2k_2 a} + 4}.$$

Kako su konstante k_1 i k_2 istog reda veličine, a broj 4 može da se zanemari u realnim slučajevima u odnosu na $\exp(k_2 a)$, izraz za T može da se napiše u približnom obliku:

$$T \approx e^{-2k_2 a} = e^{-\frac{4\pi}{h}\sqrt{2m(U-E)}a}. \tag{8.5.58}$$

Prema tome, propustljivost barijere, koja ima konačnu širinu a, i u slučaju kada je energija čestice E manja od potencijalne energije U, različita je od nule i može da se u najvećem broju slučajeva izračuna iz jednačine (8.5.58). U Tabeli 8.5.2 date su vrednosti za propustljivost barijere T, pri različitim širinama barijere a, i za stalnu vrednost razlike U-E. Kao što vidimo, za barijeru širine 1 $\mathring{A}$ propustljivost je prilično velika (10%), ali sa povećanjem širine barijere propustljivost eksponencijalno opada. Naglasimo da je prema zakonima klasične fizike, propustljivost barijere, u svim slučajevima kada je $E - U < 0$, jednaka nuli.

Tabela 8.5.2 Koeficijent propustljivosti barijere izračunat po formuli (8.5.58) za različite debljine barijere pri U-E=5 *eV*

a (nm)	0.10	0.13	0.15	0.18	0.20	0.50	1.00
T	0,100	0,051	0,032	0,016	0,010	$1{,}04\text{x}10^{-6}$	$1{,}07\text{x}10^{-10}$

8.5.5 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: trodimenzioni slučaj sa sfernom simetrijom

Trodimenziona Šredingerova jednačina u pravouglom koordinatnom sistemu, jednačina (8.4.17) ima oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + [E - U(r)]\psi = 0. \tag{8.5.59}$$

U jednačini smo naznačili da potencijalna energija U zavisi samo od koordinate r, odnosno da je ona sferno simetrična. Ovo je čest slučaj u atomskoj fizici, jer Kulonova sila, koja je preovlađujuća u atomskoj fizici, ima sferno simetrični potencijal. Funkcija ψ, u opštem slučaju zavisi od svih koordinatnih x, y i z ili, ako bismo prešli na sferne koordinate, zavisi od sfernih koordinata r, θ i φ. [O svemu ovome

biće reči detaljnije u poglavlju 9; videti jednačine (9.1.22)]. Postoje, međutim, slučajevi, kada je i talasna funkcija sferno simetrična i ne pokazuje zavisnost od uglova θ i φ ili nas u prvoj aproksimaciji zanima samo zavisnost talasne funkcije od r koordinate.

Sada ćemo jednačinu (8.5.59) da prevedemo u sferne koordinate ali ćemo se ograničiti na sferno simetrični slučaj. To znači da ćemo u izrazu za Laplasov operator, jednačina (9.1.28), da zanemarimo izvode talasne funkcije ψ po uglovima i zadržaćemo se na izrazu:

$$\Delta\psi = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\psi). \tag{9.5.60}$$

Zamenjivanjem (8.5.60) u (8.5.59) dobija se:

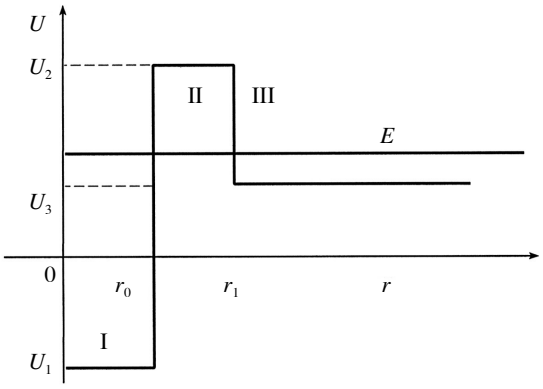
$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2(r\psi)}{dr^2} + [E - U(r)]\psi = 0. \tag{8.5.61}$$

Uvođenjem smene:

$$r\psi(r) = u(r) \tag{8.5.62}$$

jednačina (8.5.61) konačno dobija oblik:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + [E - U(r)]u = 0. \tag{8.5.63}$$



Slika 8.5.6 Prolazak čestice kroz potencijalnu barijeru – sferno simetrični slučaj.

Kako je koordinata r definisana od nule do beskonačnosti $(0 \le r \le \infty)$, a zbog zahteva da funkcija ψ bude konačna za sve vrednosti r, funkcija u mora da ima vrednost 0 za $r = 0$ (jer je $\psi = u/r$). Jednačina (8.5.63) je po obliku identična jednodimenzionoj Šredingerovoj jednačini.

Izračunaćemo sada struju gustine verovatnoće $S(r)$, (8.4.35):

$$S(r) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial(\Psi)^*}{\partial x}\right)$$

$$S(r) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{u^*}{r}\frac{d}{dr}\left(u\frac{1}{r}\right) - \frac{u}{r}\frac{d}{dr}\left(u^*\frac{1}{r}\right)\right]$$

ili:

$$S(r) = -\frac{i\hbar}{2mr^2}\left(u^*\frac{du}{dr} - u\frac{du^*}{dr}\right). \tag{8.5.64}$$

Ukupna struja gustine verovatnoće kroz sferu poluprečnika r je:

$$S_u(r) = 4\pi r^2 S(r) = -\frac{2\pi i\hbar}{m}\left(u^*\frac{du}{dr} - u\frac{du^*}{dr}\right). \tag{8.5.65}$$

Odredimo sada integral gustine verovatnoće P unutar zapremine sfere poluprečnika r_0:

$$P = \int_0^{r_0}(\psi\psi^*)4\pi r^2 dr = 4\pi\int_0^{r_0}(uu^*)dr \tag{8.5.66}$$

dok bi prema jednačini (8.4.39), promena ove verovatnoće u vremenu, u granicama od $r = 0$ do $r = r_0$, iznosila:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = 4\pi\frac{\partial}{\partial t}\int_0^{r_0}(u^*u)dr = \frac{2\pi i\hbar}{m}\left(u^*\frac{du}{dr} - u\frac{du^*}{dr}\right)\Big|_0^{r_0} = S_u(0) - S_u(r_0) = -S_u(r_0) \tag{8.5.67}$$

Istaknimo da u ovom slučaju $S_u(0)$ mora da bude nula jer bi inače postojao „izvor" čestica u tački $r = 0$. Kada je $S_u(r_0)$ ipak različito od nule, tada mora da bude različita od nule promena integrala gustine verovatnoće u vremenu, a između $r = 0$ i $r = r_0$. Ove zaključke iskoristićemo da izračunamo verovatnoću da čestica pređe iz sredine I u sredinu III, vršeći u oblasti II tunel efekt, Slika 8.5.6. U oblasti I i III potencijalna energija čestice niža je od ukupne energije, dok je u oblasti II potencijalna energija čestice veća od njene ukupne energije. U skladu sa prethodnim razmatranjem, zanima nas verovatnoća da čestica napusti sferu poluprečnika r_0 (npr. slučaj emisije α čestice iz jezgra). Napisaćemo Šredingerove jednačine za ovaj slučaj:

$$I: \frac{d^2u_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_1)u_1 = 0;\ 0 \le r \le r_0 \tag{8.5.68}$$

$$II: \frac{d^2u_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_2)u_2 = 0;\ r_0 \le r \le r_1 \tag{8.5.69}$$

$$III: \frac{d^2u_3}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_3)u_3 = 0; \quad r \geq r_1. \tag{8.5.70}$$

Rešenja ovih jednačina su:

$$I: u_1(r) = r\psi_1(r) = A_1 e^{ik_1 r} + B_1 e^{-ik_1 r}; \quad k_1 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2m(E - U_1)} \tag{8.5.71}$$

$$III: u_3(r) = r\psi_3(r) = A_3 e^{ik_3 r}; k_3 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2m(E - U_3)}. \tag{8.5.72}$$

Rešenje Šredingerove jednačine u oblasti II nam za sada nije potrebno, mada nam je poznato odranije (videti poglavlje 8.5.4) da rešenje mora biti ekponencijalno opadajuća funkcija. Treba, takođe imati na umu da U_1 ima negativnu vrednost. Smatraćemo da je verovatnoća prolaska čestice iz oblasti I u III izuzetno mala, što znači da upadni i reflektovani talas imaju iste koeficijente (A_1), pa jednačina (8.5.71) dobija oblik:

(8.5.71a) $$I: u_1(r) = r\psi_1(r) = 2iA_1 \sin k_1 r; \quad k_1 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2m(E - U_1)}.$$

Izračunaćemo sada ukupnu verovatnoću nalaženja čestice unutar sfere poluprečnika r_0, pomoću jednačine (8.5.66) i (8.5.71a), uzimajući u obzir da zbog konačnosti funkcije $\psi(r)$ mora da bude ispunjeno i $u(0) = 0$ zbog čega se funkcija U_1(r) svodi na sinusni deo:

$$P = 4\pi \int_0^{r_0} (u_1^* u_1) dr \approx 4\pi[2|A_1|^2 r_0]\cdot \tag{8.5.73}$$

Pomoću izraza za ukupan fluks kroz sferu određenog poluprečnika, jednačina (8.5.65) i izraza za propušteni talas u_3, jednačina (8.5.72), može da se izračuna struja gustine verovatnoće izvan barijere, u oblasti III:

$$S_{III} = -\frac{2\pi i\hbar}{m}\left(u_3^* \frac{du_3}{dr} - u_3 \frac{du_3^*}{dr}\right) = \frac{4\pi\hbar}{m} k_3 A_3^2 = 4\pi \upsilon_3 A_3^2 \tag{8.5.74}$$

gde je $\upsilon_3 (= \hbar k_3 / m)$ brzina čestice u oblasti III. Uzimajući u obzir uslov održanja, jednačine (8.4.34) i (8.5.67), sledi:

$$\frac{dP}{dt} = -S_3$$

ili:

$$2r_0 \frac{d}{dt}|A_1|^2 = -\upsilon_3 A_3^2. \tag{8.5.75}$$

Deljenjem obe strane jednačine (8.5.75) sa A_1^2 i prebacivanjem dt na desnu stranu dobija se:

$$\frac{d|A_1|^2}{|A_1|^2} = -\frac{\upsilon_3}{2r_0}\frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}dt.$$

Kako je verovatnoća nalaženja čestice unutar sfere poluprečnika r_0 upravo srazmerna sa A_1^2, to leva strana prethodne jednačine pokazuje kako se ova verovatnoća (P) menja se vremenom:

$$\frac{dP}{P} = -\frac{\upsilon_3}{2r_0}\frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}dt = -\zeta dt \tag{8.5.76}$$

ili:

$$P(t) = P(0)e^{-\zeta t}$$

pri čemu je konstanta ζ:

$$\zeta = \frac{\upsilon_3}{2r_0}\frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \tag{8.5.77}$$

Potražimo sada vezu između koeficijenta ζ i koeficijenta propustljivosti barijere T. Kako je potencijalna energija čestice sleve i s desne strane barijere različita, U_1 i U_3, prema (8.5.24) koeficijent propustljivosti T zavisi od odnosa amplituda odgovarajućih talasa ali i od odnosa brzina čestica:

$$T = \frac{\upsilon_3|A_3|^2}{\upsilon_1|A_1|^2} \tag{8.5.78}$$

pa iz (8.5.77) i (8.5.78) može da se nađe veza između koeficijenta ζ i koeficijenta propustljivosti T:

$$\zeta = \frac{\upsilon_1}{2r_0}T. \tag{8.5.79}$$

Količnik $\upsilon_1/2r_0$ pokazuje i koliko puta u jednoj sekundi čestica udari o „zid" potencijalne barijere pokušavajući da prođe napolje. Koeficijent propustljivosti T je čisto kvantnomehanički pojam koji govori o mogućnosti tunel efekta. Na jednačinu (8.5.79) vratićemo se kada u poglavlju o radioaktivnosti bude govora o α raspadu.

Primeri

Primer 8.5.1 Koliki je koeficijent propustljivosti barijere širne a ako je visina barijere $U = E_0$ a energija čestice pre nailaska na barijeru je $E_0/2$. Širina barijere je: a) $a = 2\lambda$, b) $\lambda = 2a$ gde je λ De Broljijeva talasna dužina pridružena čestici energije $E_0/2$.

REŠENJE:

Upotrebićemo jednačinu (8.5.57):

$$a)\ T = \frac{4}{sh^2(k_2a)+4};\ k_2a = \frac{2\pi}{h}\sqrt{\frac{2mE_0}{2}}\cdot\frac{h}{\sqrt{\frac{2mE_0}{2}}}\cdot 2 = 4\pi;$$

$$T = \frac{4}{\left(\frac{e^{4\pi}-e^{-4\pi}}{2}\right)^2+4} = 1{,}94\cdot 10^{-10}$$

$$b)\ k_2a = \pi;\ T = \frac{4}{\left(\frac{e^{\pi}-e^{-\pi}}{2}\right)^2+4} = 0{,}0291.$$

Primer 8.5.2 Uporediti koeficijente propustljivosti deuterijuma i vodonika, energije 5 eV, koji prolaze kroz potencijalnu barijeru visine 10 eV i širine 0,01 nm.

REŠENJE:

Deuterijum ima (oko) dva puta veću masu od protona i zbog toga ima manji koeficijent propustljivosti relacije (8.5.58):

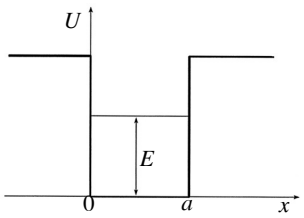
$$\frac{T_1}{T_2} = e^{-\frac{4\pi}{h}\sqrt{2m_D(U-E)}a\left(1-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)} = e^{-\frac{4\cdot 3{,}142}{6{,}626\cdot 10^{-34}Js}\sqrt{4\cdot 1{,}673\cdot 10^{-27}kg\cdot 5\cdot 1{,}6\cdot 10^{-19}J}\,0{,}01\cdot 10^{-9}m\cdot 0{,}29} = 0{,}018.$$

8.6 POTENCIJALNE JAME

8.6.1 Čestica u jednodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima

Potencijalna jama je oblast u kojoj je potencijalna energija čestice ili nula ili je predstavljamo negativnim vrednostima. Izvan jame potencijalna energija čestice je beskonačno velika. Promena potencijalne energije čestice događa se pod dejstvom neke sile u okolini tačaka x=0 i x=a (mada je promena potencijala na slici prikazana vertikalnom linijom) i ove tačke predstavljaju položaj „zidova" jame. Dakle, unutar jame, $0 \le x \le a$, oblast II, potencijalna energija čestice U jednaka je 0. Izvan jame, $-\infty < x \le 0$, i $a \le x < +\infty$, oblasti I i III, potencijalna energija je beskonačno velika, Slika 8.6.1.

Napisaćemo sada Šredingerove jednačine za oblast I, II i III:



Slika 8.6.1 Potencijalna jama sa beskonačno visokim zidovima.

$$I:\ \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi_1 = 0 \quad -\infty < x \le 0 \tag{8.6.1}$$

$$II:\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi_2 = 0 \quad 0 \le x \le a \tag{8.6.2}$$

$$III:\ \frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi_3 = 0 \quad a \le x < +\infty\ . \tag{8.6.3}$$

Po istom postupku kao ranije, nalazimo rešenja Šredingerovih jednačina za oblast I, II i III. Ona glase:

$$I:\ \psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x};\ -\infty < x \le 0\ \ k_1 = \frac{\sqrt{8\pi^2 m(U-E)}}{h} \tag{8.6.4}$$

$$II:\ \psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x};\ 0 \le x \le a\ \ k_2 = \frac{\sqrt{8\pi^2 mE}}{h} \tag{8.6.5}$$

$$III:\ \psi_3(x) = A_3 e^{k_1 x} + B_3 e^{-k_1 x};\ a \le x < +\infty\ . \tag{8.6.6}$$

Rešenja u oblasti I i III su eksponencijalne funkcije, dok je u oblasti II funkcija kompleksna (ima oscilatorni karakter). Pokazaćemo sada da je vrednost talasne funkcije izvan potencijalne jame jednaka nuli. Konstante $A_1 ... B_3$, koje se javljaju u izrazima za talasne funkcije, odredićemo iz uslova da funkcija ψ mora da bude konačna i neprekidna za sve vrednosti x-koordinate. Da bi funkcija u oblasti I bila uvek konačna, mora da bude $B_1=0$ (inače bi za $x \to -\infty$, $\psi \to \infty$). Zbog toga treba da bude $A_3=0$ (inače $\psi \to \infty$ za $x \to \infty$). Dakle, levo od potencijalne jame, izraz za talasnu funkciju svodi se na:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x}\ \ x \le 0 \tag{8.6.7}$$

a desno od jame:

$$\psi_3(x) = B_3 e^{-k_1 x}\ \ x \ge a\,. \tag{8.6.8}$$

Kako je u ovim oblastima potencijalna energija beskonačno visoka, tada i $k_1 \to \infty$, pa su oba izraza (8.6.7) i (8.6.8) jednaka nuli. Prema tome, izvan jame vrednost talasne funkcije ψ jednaka je nuli, što znači da u oblastima I i III ne može da se nađe čestica.

Analizirajmo sada talasnu funkciju $\psi_2(x)$ koja je rešenje Šredingerove jednačine za oblast II. Rešenje (8.6.5) može da se napiše u trigonometrijskom obliku. Koristeći Ojlerov obrazac:

$$e^{\pm ik_2x} = \cos(k_2x) \pm i\sin(k_2x) \tag{8.6.9}$$

jednačina (8.6.5) dobija sada oblik:

$$\psi_2(x) = C_2\sin(k_2x) + D_2\cos(k_2x) \tag{8.6.10}$$

pri čemu je:

$$C_2 = i(A_2 - B_2) \; i \; D_2 = A_2 + B_2 .$$

Konstante C_2 i D_2 koje određuju oblik talasne funkcije unutar jame, odredićemo iz uslova neprekidnosti talasne funkcije na mestima promene potencijala, x=0 i x=a i iz zahteva da čestica mora da bude negde unutar jame (uslov normiranja). Pošto je izvan jame $\psi(x)$=0, sledi da talasna funkcija (8.6.10) mora da zadovoljava granične uslove $\psi_2(0)$=0 i $\psi_2(a)$=0, odnosno uslov neprekidnosti. Prvi od njih daje:

$$\psi_2(0) = D_2 = 0$$

što znači da se talasna funkcija (u jami) svodi na oblik:

$$\psi_2(x) = C_2\sin(k_2x) . \tag{8.6.11}$$

Drugi uslov neprekidnosti glasi:

$$\psi_2(a) = C_2\sin(k_2x) = 0$$

što je zadovoljeno za:

$$k_2a = n\pi \; n = 1, 2, 3, \ldots \tag{8.6.12}$$

Zamenjivanjem izraza za k_2 (jednačina 8.6.5) u (8.6.12), dobija se:

$$E_n = \frac{n^2h^2}{8ma^2} . \tag{8.6.13}$$

Energiju čestice E, jednačina (8.6.5), napisali smo sada sa indeksom n, označivši sa E_n energiju koju čestica ima u stanju opisanom brojem n, dakle u kvantnom stanju n. Jednačina (8.6.13) pokazuje da čestica ne može da ima bilo koje (kontinualne) vrednosti, već samo određene, diskretne vrednosti energije. Konstantu C_2 određujemo iz uslova normiranja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_2(x)\,\psi_2^*(x)\,dx = \int_0^a |\psi_2(x)|^2\,dx = |C_2|^2 \int_0^a \sin^2(k_2x)\,dx = 1. \tag{8.6.14}$$

Ovaj integral lako se izračunava:

$$|C_2|^2\int_0^a \sin^2(k_2x)dx = |C_2|^2\int_0^a \frac{1-\cos(2k_2x)}{2}dx = |C_2^2|\left|\frac{x}{2}-\frac{1}{4}\sin(2k_2x)\right|_0^a = |C_2^2|\frac{a}{2}.$$

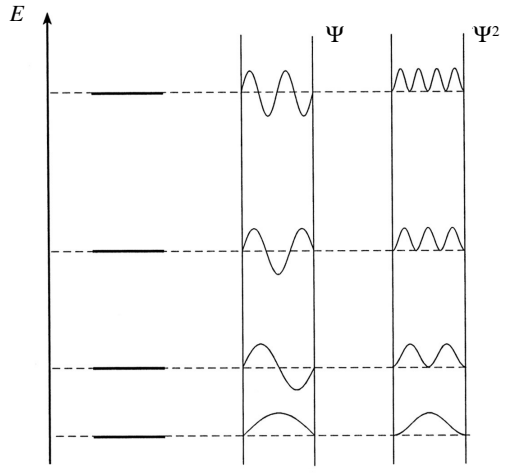
Izjednačavanjem ovog rezultata sa 1 dobija se:

$$C_2 = \sqrt{\frac{2}{a}} \tag{8.6.15}$$

Konačan oblik talasne funkcije, prema tome je:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \tag{8.6.16}$$

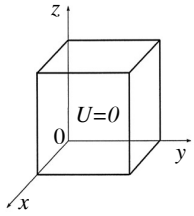
Na Slici 8.6.2 su prikazani energijski nivoi E_n i njima odgovarajuće talasne funkcije $\psi_n(x)$, kao i kvadrati ovih talasnih funkcija $\psi_n^2(x)$ koji određuju gustinu verovatnoće nalaženja čestice. Kao što se sa slike vidi, u kvantnom nivou n=1, sa najvećom verovatnoćom česticu možemo da nađeno u sredini jame, dok je verovatnoća nalaženja čestice na zidovima jednaka nuli. Ovaj rezultat razlikuje se od onog koji bi dala klasična fizika. „Klasičnu" česticu možemo, sa podjednakom verovatnoćom, da nađemo bilo gde u jami. Slika dalje pokazuje da sa porastom energije (i kvantnog broja n) maksimumi krivih leže sve bliže jedan drugom, tako da bi se pri vrlo velikom broju n dobio rezultat kao za „klasičnu" česticu. I ovo može da se smatra dokazom ispunjenosti principa korespondencije.



Slika 8.6.2 Energijski nivoi, talasne funkcije i funkcije gustine verovatnoće nalaženja čestice u potencijalnoj jami sa beskonačno visokim zidovima.

8.6.2 Čestica u trodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima

Neka se čestica nalazi u trodimenzionoj jami, Slika 8.6.3. Ponovo ćemo energiju da računamo u odnosu na dno potencijalne jame. Tada je potencijalna energija: $U = 0$ za $0 \le x \le a$; $0 \le y \le b$; $0 \le z \le c$; a $U = \infty$ u svim ostalim slučajevima. Izvan potencijalne jame, talasna funkcija ψ jednaka je nuli (videti 8.6.1). Unutar jame Šredingerova jednačina ima oblik:



Slika 8.6.3 Čestica u trodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima.

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi = 0\,. \tag{8.6.17}$$

Rešenje jednačine potražićemo uobičajenim metodom razdvajanja promenljivih. Dakle, pretpostavićemo da funkcija ψ koja je rešenje naše jednačine (i koje zavisi od tri promenljive) može da se napiše kao proizvod tri funkcije od kojih svaka zavisi samo od jedne promenljive:

$$\psi(x,y,z) = X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z)\,. \tag{8.6.18}$$

Na ovaj način pokušavamo da parcijalnu diferencijalnu jednačinu (8.6.17) rastavimo na tri obične diferencijalne jednačine. Potražimo najpre izvode funkcije (8.6.18):

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = YZ\frac{d^2X}{dx^2};\ \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = XZ\frac{d^2Y}{dy^2};\ \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = XY\frac{d^2Z}{dz^2}. \tag{8.6.19}$$

Uvrštavanjem funkcije ψ, jednačina (8.6.18), i njenih izvoda, jednačina (8.6.19), u jednačinu (8.6.17) dobija se:

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2}Y(y)Z(z)+\frac{d^2Y(y)}{dy^2}X(x)Z(z)+\frac{d^2Z(z)}{dz^2}X(x)Y(y)+$$
$$+\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\cdot X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z) = 0\,. \tag{8.6.20}$$

Jednačinu (8.6.20) podelićemo sa $X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z)$. Dobićemo:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y(y)}{dy^2}+\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z(z)}{dz^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\,. \tag{8.6.21}$$

Prvi član u jednačini (8.6.21) zavisi samo od x, drugi od y, a treći od z, dok je njihov zbir jednak konstanti. Ovo je moguće samo u slučaju kada je i svaki od ta tri sabirka stalan. Ukupnu energiju E napisaćemo sada kao zbir tri konstante E_1, E_2 i E_3:

$$E = E_1+E_2+E_3\,. \tag{8.6.22}$$

Uz ovu smenu jednačina (8.6.21) rastavlja se na tri jednačine:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}E_1;\ \frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y(y)}{dy^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}E_2;\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z(z)}{dz^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}E_3$$

odnosno:

$$\begin{aligned}\frac{d^2X(x)}{dx^2} + \frac{8\pi^2 mE_1}{h^2}X(x) &= 0\\ \frac{d^2Y(y)}{dy^2} + \frac{8\pi^2 mE_2}{h^2}Y(y) &= 0\\ \frac{d^2Z(z)}{dz^2} + \frac{8\pi^2 mE_3}{h^2}Z(z) &= 0\,.\end{aligned} \tag{8.6.23}$$

Svaka od ovih jednačina identična je Šredingerovoj jednačini za česticu u jednodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima. Funkcije X, Y i Z zadovoljavaju sledeće granične uslove: $X(a)=X(0)=0$; $Y(b)=Y(0)=0$; $Z(c)=Z(0)=0$ (uslove neprekidnosti) i uslove normiranja:

$$\int_0^a |X(x)|^2 dx = 1;\ \int_0^b |Y(y)|^2 dy = 1;\ \int_0^c |Z(z)|^2 dz = 1$$

pa su rešenja jednačina (8.6.23):

$$\begin{aligned}X(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right)\\ Y(y) &= \sqrt{\frac{2}{b}}\sin\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right)\\ Z(z) &= \sqrt{\frac{2}{c}}\sin\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right).\end{aligned} \tag{8.6.24}$$

Za enegije E_1, E_2 i E_3 dobija se:

$$E_1 = \frac{n_1^2h^2}{8ma^2};\quad E_2 = \frac{n_2^2h^2}{8mb^2};\quad E_3 = \frac{n_3^2h^2}{8mc^2}\ . \tag{8.6.25}$$

Prema tome, talasna funkcija za česticu u trodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima ima oblik:

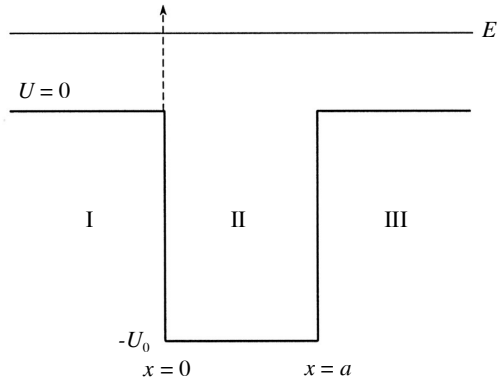
$$\psi_{n_1n_2n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\ \sin\frac{n_2\pi y}{b}\sin\frac{n_3\pi z}{c}\,. \tag{8.6.26}$$

Diskretne vrednosti energije koje čestica može da ima su:

$$E = E_1 + E_2 + E_3 = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right) \qquad (8.6.27)$$

$$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots$$

8.6.3 Prolaz čestice kroz pravougaonu potencijalnu jamu; Ramzauerov efekt



Slika 8.6.4 Prolazak čestice kroz pravougaonu potencijalnu jamu.

Posmatraćemo sada kretanje mlaza čestica sa ukupnom energijom E (u odnosu na nultu vrednost potencijalne energije U) koji prolazi kroz oblasti I, II i III, kao na Slici 8.6.4. U oblasti I i III potencijalna energija čestice U jednaka je nuli, dok se u oblasti II potencijalna energija čestice skokovito menja od 0 od $-U_0$. Kažemo da čestica nailazi na potencijalnu, pravougaonu jamu dubine U_0 i širine a. Pretpostavićemo da mlaz čestica delimično prolazi kroz jamu, a delimično se reflektuje na ivicama jame. Da bismo odredili koeficijente transparencije, napisaćemo, kao i u prethodnim slučajevima, Šredingerove jednačine za oblasti I, II i III:

$$I: \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi_1 = 0 \quad -\infty < x \le 0 \qquad (8.6.28)$$

$$II: \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E + U_0)\psi_2 = 0 \quad 0 \le x \le a \qquad (8.6.29)$$

$$III: \frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi_3 = 0 \quad a \le x < +\infty \qquad (8.6.30)$$

i na isti način kao ranije, naći ćemo rešenje Šredingerovih jednačina za oblasti I, II i III. Ona glase:

$$I: \psi_1(x) = A_0 e^{ik_1 x} + A e^{-ik_1 x} \quad -\infty < x \le 0, \; k_1 = \frac{\sqrt{8\pi^2 mE}}{h} \qquad (8.6.31)$$

$$II: \psi_2(x) = B e^{ik_2 x} + C e^{-ik_2 x} \quad 0 \le x < a, \; k_2 = \frac{\sqrt{8\pi^2 m(E + U_0)}}{h} \qquad (8.6.32)$$

$$III\text{: } \psi_3(x) = De^{ik_1 x},\ a \le x < +\infty \tag{8.6.33}$$

i sve imaju oscilatorni karakter. Postavićemo uslove neprekidnosti funkcija i njihovih izvoda na granicama intervala:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)\quad \psi_2(a) = \psi_3(a)$$
$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0)\quad \psi'_2(a) = \psi'_3(a)$$

pa se primenom uslova neprekidnosti na funkcije određene izrazima (8.6.31), (8.6.32) i (8.6.33), dobija:

$$\begin{aligned} A_0 + A &= B + C \\ ik_1A_0 - ik_1A &= ik_2B - ik_2C \\ Be^{ik_2a} + Ce^{-ik_2a} &= De^{ik_1a} \\ ik_2Be^{ik_2a} - ik_2Ce^{-ik_2a} &= ik_1De^{ik_1a}. \end{aligned} \tag{8.6.34}$$

Nameravamo sada da pomoću jednačina (8.6.34) odredimo koeficijent propustljivosti T potencijalne jame, odnosno udeo čestica koji iz oblasti I prelazi u oblast III. Kao i u prethodnim sličnim slučajevima, koeficijent propustljivosti jednak je $|D/A_0|^2$. Iz jednačine (8.6.34) lako se dobija:

$$T = \left|\frac{D}{A_0}\right|^2 = \left(\frac{D}{A_0}\right)\cdot\left(\frac{D}{A_0}\right)^* = \frac{4k_1k_2}{[(k_1+k_2)^2e^{ik_2a} - (k_2-k_1)^2e^{-ik_2a}]e^{ik_1a}}\cdot \tag{8.6.35}$$
$$\frac{4k_1k_2}{[(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a} - (k_2-k_1)^2e^{ik_2a}]e^{-ik_1a}}.$$

Posmatraćemo neke granične slučajeve:

1) $k_1 << k_2$ ili $E << U_0$. Tada dobijamo:

$$T = \frac{(4k_1k_2)^2}{(k_2^2e^{-ik_2a} - k_2^2e^{ik_2a})e^{-ik_1a}\cdot(k_2^2e^{ik_2a} - k_2^2e^{-ik_2a})e^{ik_1a}} = \tag{8.6.36}$$
$$\frac{(4k_1k_2)^2}{[-(2ik_2^2\sin k_2a)]\cdot[+(2ik_2^2\sin k_2a)]} = \frac{4k_1^2}{k_2^2\sin^2 k_2a} \sim E$$

dakle, propustljivost barijere raste linearno sa energijom čestice. Ako su istovremeno ispunjeni uslovi da $E \to 0$ i $k_2a = n\pi$ (ovaj slučaj opisaćemo kasnije) dobija se da koeficijent transparencije teži jedinici.

2) U slučaju kada je $E >> U_0$ ili $k_2 \approx k_1$ dobijamo:

$$T = \frac{4k_1^2}{(4k_1^2 e^{-ik_2 a})e^{-ik_1 a}} \cdot \frac{4k_1^2}{(4k_1^2 e^{ik_2 a})e^{ik_1 a}} = 1 \tag{8.6.37}$$

što znači da čestice ne „oseća" prisustvo potencijalne jame i nesmetano prolazi kroz nju.

3) Kada je $k_2 a = n\pi$ (rezonantni slučaj), sledi:

$$2a = n\lambda_2 \tag{8.6.38}$$

gde je λ_2 talasna dužina De Broljijevog talasa koji je pridružen čestici. I zaista, kako je kinetička energija čestice u jami T, jednaka $E + U_0$ sledi:

$$k_2 = \frac{\sqrt{8\pi^2 m(E + U_0)}}{h} = \frac{\sqrt{8\pi^2 mT}}{h} = \frac{2\pi}{\lambda_2}. \tag{8.6.39}$$

Jednačina (8.3.39) dobija se kada se uzme u obzir veza između impulsa čestice p_2 u jami i talasne dužine pridružene čestici λ_2, koja je data De Broljijevom jednačinom. Za $k_2 a = n\pi$ je:

$$e^{ik_2 a} = e^{-ik_2 a} = +1$$

za n parno i:

$$e^{ik_2 a} = e^{-ik_2 a} = -1$$

za n neparno. Dalje, na osnovu relacije (8.6.35) se dobija:

$$T = \frac{4k_1 k_2}{[(k_1 + k_2)^2 + (k_1 - k_2)^2]e^{ik_1 a}} \times \frac{4k_1 k_2}{[(k_1 + k_2)^2 + (k_1 - k_2)^2]e^{-ik_1 a}} = 1. \tag{8.6.40}$$

Poslednjom jednačinom pokazano je da je jama potpuno prozračna za čestice s energijama koje ispunjavaju uslov $k_2 a = n\pi$. Istovremeno, ovaj uslov znači da je širina jame a jednaka celobrojnom umnošku polovina talasnih dužina De Broljijevog talasa koji je pridružen čestici u jami, jednačina (8.6.38). Ovakva pojava može se uporediti sa selektivnim propuštanjem svetlosti kroz uzane slojeve stakla i dielektrika (filtri). Pažljivim izborom debljine filtra postiže se koeficijent propustljivosti $T \sim 1$ u uskom opsegu talasne dužine λ i $\lambda + \Delta\lambda$.

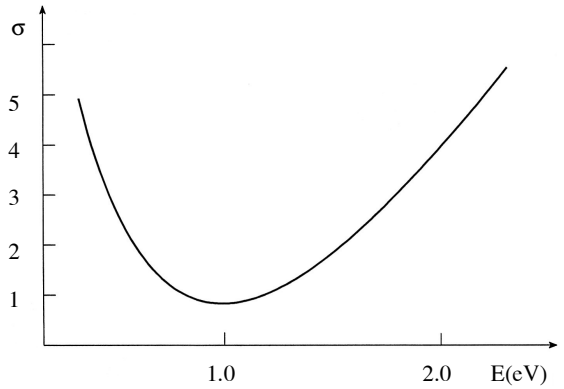
Slučaj koji je opisan jednačinom (8.6.38) sreće se u eksperimentima pod nazivom Ramzauerov efekt ili tačnije Ramzauer-Taunsendov efekt, nazvan po istraživačima koji su ga, nezavisno jedan od drugog, otkrili. U ovim eksperimentima ispitivano je rasejavanje elektrona na određenim atomima i zapaženo je da **efikasni presek** (videti poglavlje 10.1) za zahvatanje elektrona metom određene vrste ima najmanju vrednost pri određenoj energiji elektrona, Slika 8.6.5. To, praktično, znači da elektroni sa takvom energijom u potpunosti prolaze kroz metu. U skladu sa teorijskim proračunom koji smo razmatrali, u ovom slučaju atom poluprečnika R smatraćemo pravougaonom potencijalnom jamom, što znači da je $a = 2R$, pa naš uslov, prema (8.6.38), glasi:

$\lambda_2 = 4R$ ili što odgovara, na osnovu De Broljijeve jednačine, kinetičkoj energiji elektrona unutar jame:

$$\lambda_2 = \frac{h}{p_2};$$

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{h^2}{32mR^2}$$

pa se za R = 1 Å dobija za kinetičku energiju elektrona **unutar jame** vrednost od 10 eV. Prema Slici 8.6.5 minimum krive, koja pokazuje zavisnost efikasnog preseka za zahvatanje elektrona od energije upadnih elektrona, leži na oko 1 eV, ukazujući na to da dubina potencijalne jame iznosi oko 10 eV (tačnije 9 eV jer je $U_0 = E - T = 1\text{-}10 = -9$ eV).



Slika 8.6.5 Ramzauerov efekt. Minimum efikasnog preseka kod rasejavanja elektrona ksenonom javlja se pri početnoj energiji elektrona od 1 eV.

Kao što smo ranije pomenuli, ovakvo ponašanje elektrona slično je pojavi selektivnog propuštanja svetlosti određene talasne dužine, kroz tanke slojeve stakla ili nekih durgih dielektrika. Pažljivim podešavanjem debljine pločice postiže se da pločica propusti svetlost određene talasne dužine, pri čemu je smanjenje intenziteta daleko manje nego kod običnih obojenih filtera.

Primeri

Primer 8.6.1 Izvesti opšti oblik izraza za koeficijent transparencije T kod prolaska čestice kroz potencijalnu jamu. Nacrtati zavisnost koeficijenta transparencije T od E/U_0, gde je E početna energija elektrona, a U_0 dubina potencijalne jame. Uzeti da je dubina jame 10 KeV, a širina 1 Å.

REŠENJE:

Na osnovu jednačine (8.6.35) dobija se:

$$T = \frac{(4k_1k_2)^2}{[(k_1+k_2)^2]^2 + [(k_1-k_2)^2]^2 - 2(k_1+k_2)^2(k_1-k_2)^2(\cos^2 k_2a - \sin^2 k_2a)}. \quad (8.6.41)$$

Sređivanjem jednačine (8.6.41), dobija se:

$$T = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2-k_2^2)^2 \sin^2 k_2a}. \quad (8.6.42)$$

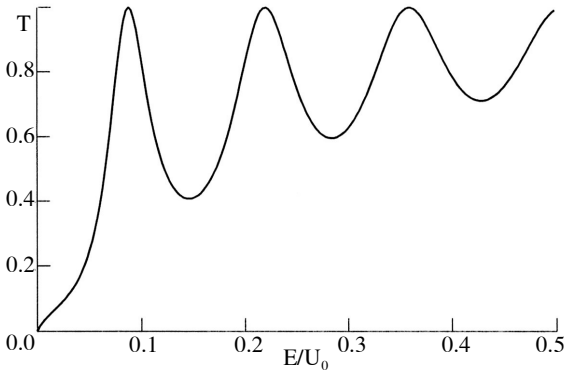
Zamenjivanjem izraza za k_1 i k_2, jednačine (8.6.31) i (8.6.32) i uvođenjem smena:

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}a = \beta; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}; \quad \frac{E}{U_0} = \eta$$

dobija se izraz pogodan za izračunavanje i grafičko predstavljanje:

$$T = \frac{4\eta(1+\eta)}{4\eta(1+\eta) + \sin^2(\beta\sqrt{1+\eta})}. \tag{8.6.43}$$

Pri vrednosti U_0 = 10 KeV ($\beta = 16{,}3\pi$) i za E/U_0 u rasponu od 0,01 do 0,5 dobija se kriva kao na Slici 8.6.6.



Slika 8.6.6 Zavisnost koeficijenta transparencije od energije elektrona. Dubina potencijalne jame iznosi 10 *k*eV ($a\sqrt{2mU_0}/\hbar = \beta = 16, 3\pi$). Potpuna, stoprocentna propustljivost dobija se pri određenim vrednostima energije elektrona.

Primer 8.6.2 Napišite talasnu funkciju elektrona koji se ubrzan naponom od a) 10 V, b) 1000 V, kreće u pozitivnom smeru *x*-ose. Kolike su De Broljijeve talasne dužine elektrona u oba slučaja?

REŠENJE:

a) $T = E = (1,602 \cdot 10^{-19} C \cdot 10V) = 1,602 \cdot 10^{-18} J$

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x} = Ae^{i27,68x/nm}; \quad \lambda = \frac{2\pi}{27,68} = 0,227nm;$$

b) $E = 1,602 \cdot 10^{-16} J; \quad \psi = Ae^{i276,8x/nm}; \quad \lambda = \frac{2\pi}{276,8} = 0.0227nm.$

Primer 8.6.3 Elektron se nalazi u jami sa beskonačno visokim zidovima. Kolika širina jame treba da bude pa da energija elektrona u osnovnom stanju bude jednaka njegovoj energiji mirovanja, $E_1 = m_0c^2$?

REŠENJE:

$$E_1 = \frac{h^2}{8m_0a^2} = m_0c^2 \Rightarrow a = \frac{h}{\sqrt{8}m_0c} = \frac{1}{\sqrt{8}}\lambda_C = 0,353 \cdot 0,00242nm = 8,578 \cdot 10^{-4}nm.$$

λ_C je Komptonova talasna dužina.

Primer 8.6.4 Jezgro atoma možemo shvatiti kao potencijalnu jamu u kojoj su smešteni nukleoni sa diskretnim vrednostima energije. Ako je širina potencijalne jame $2r$ gde je r poluprečnik jezgra, npr. deuterijuma ($2r=3\cdot10^{-15}$m), odrediti energiju pobuđivanja ovog jezgra iz osnovnog u prvo pobuđeno. Masa protona je $1{,}673\cdot10^{-27}$kg.

REŠENJE:

$$E_2 - E_1 = \frac{3h^2}{8m(2r)^2} = \frac{3(6,626\cdot10^{-34})^2 J^2 s^2}{8\cdot(3\cdot10^{-15})^2 m^2 1,673\cdot10^{-27} kg} = 1,092\cdot10^{11} J = 68{,}25 MeV.$$

Primer 8.6.5 Kolika je degeneracija energijskog stanja $E_n=14h^2/(8ma^2)$ ako se čestica mase m nalazi u trodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima?

REŠENJE:

U skladu sa relacijom (8.6.27), energija čestice je:

$$E_n = \frac{(n_x^2+n_y^2+n_z^2)h^2}{8ma^2} = \frac{(3^2+2^2+1^2)h^2}{8ma^2} = \frac{14h^2}{8ma^2}.$$

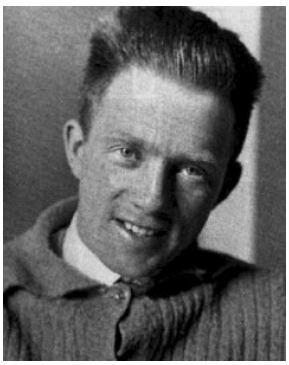
Degenerisana stanja su stanja iste energije koja se mogu, međutim, realizovati na različite načine. U našem slučaju to znači kombinovanjem kvantnih brojeva n_x, n_y, n_z, pri čemu svaki od ovih brojeva može imati vrednosti 1 ili 2 ili 3. Takvih kombinacija ima šest:

n_x	n_y	n_z
1	2	3
1	3	2
2	1	3
2	3	1
3	1	2
3	2	1

pa je stepen degeneracije stanja $E_n=14h^2/(8ma^2)$ 6.

Princ Luj – Viktor de Brolji (Prince Louis – Victor de Broglie, 1892–1987), rodio se u Dijepu (Francuska). U doktoratu koji je odbranio na Sorboni 1924. godine, postavio je čuvenu relaciju između impulsa čestice i talasne dužine, koju je E. Šredinger iskoristio u formulaciji talasne mehanike. Bio je predavač na Sorboni a kasnije profesor teorijske fizike i direktor Instituta Anri Poenkare. Za otkriće talasne prirode elektrona dobio je Nobelovu nagradu za fiziku 1929. godine.

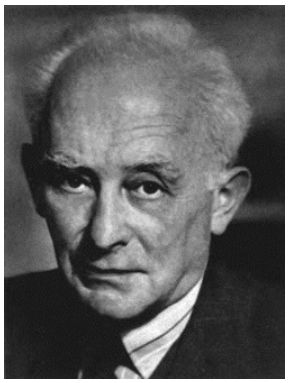
Ervin Šredinger (Erwin Schrödinger, 1887–1961), rodio se u Beču, gde je i studirao fiziku. Dok je bio profesor u Cirihu bavio se statističkom termodinamikom, opštom teorijom relativnosti i teorijom opažanja boja. Godine 1926. postavio je čuvenu jednačinu i iste godine dokazao ekvivalentnost talasnog i matričnog kvantnomehaničkog formalizma. Bio je profesor Berlinskog univerziteta posle Maksa Planka, 1927–1933, ali je, kao poznati liberal, morao da emigrira iz Nemačke. Iste godine (1933), dodeljena mu je, zajedno sa Dirakom, Nobelova nagrada za fiziku, za istraživanja u oblasti atomske strukture. Godine 1936. vratio se u Grac ali je opet morao da emigrira kada je Austrija pripojena Nemačkoj. Od 1940. do 1955. godine bio je profesor u Institutu za fundamentalna istraživanja u Dablinu. Njegovi radovi odigrali su ključnu ulogu u izgradnji kvantne teorije i predstavljaju osnovu na kojoj se zasniva savremena atomska fizika.



Verner Hajzenberg (Werner Heisenberg, 1901–1976), rodio se u Vircburgu (Nemačka) a doktorirao na Minhenskom univerzitetu kod Arnolda Zomerfelda, koji je bio profesor i mentor. Tri godine je proveo u Kopenhagenu kod Nilsa Bora a u periodu 1927–1941. bio je profesor teorijske fizike u Lajpcigu i Berlinu. Godine 1941. postaje profesor i direktor Instituta za fiziku „Maks Plank" prvo u Berlinu, a zatim u Getingenu i najzad, od 1955, u Minhenu. Godine 1927. formulisao je princip neodređenosti na kome se zasniva „Kopenhagenska interpretacija" kvantne mehanike. Za stvaranje kvantne mehanike u matričnoj formi, 1932. godine dobio je Nobelovu nagradu za fiziku.

Ser Džordž Padžet Tomson (Sir George Paget Thomson, 1892–1975), je, kao i njegov otac Dž. Dž. Tomson, pohađao Triniti koledž u Kembridžu, gde je u Kevendiškoj laboratoriji neko vreme proveo kao postdiplomac. Radio je u Kembridžu, Univerzitetu u Aberdinu i Imperijalnom koledžu u Londonu. Izučavao je rasejanje elektrona na celuloidu i tako uočio njegovu talasnu prirodu. Za taj rad, zajedno sa Devisonom, podelio je Nobelovu nagradu za fiziku 1937. godine. Neko je primetio da je Dž. Dž. Tomson (otac) dobio Nobelovu nagradu zato što je pokazao da je elektron čestica a Dž. P. Tomson (sin) zato što je pokazao da on to nije.

Klinton Džozef Dejvison (Clinton Joseph Davisson, 1881–1958), rodio se u Blumingtonu (Ilinois, SAD). Od 1917. do 1946. bio je istraživač u Belovim laboratorijama, u periodu 1946–1954, profesor na Virdžinija univerzitetu u Šarlotsvilu. Zajedno sa Džermerom 1927. godine eksperimentalno je dokazao difrakciju elektrona na kristalima, što je predstavljalo odlučujuću potvrdu talasne prirode materije. Nobelovu nagradu za fiziku dobio je sa Dž. P. Tomsonom 1937. godine za eksperimentalni pronalazak difrakcije elektrona na kristalima.



Maks Born (Max Born, 1882–1970) se rodio u Breslau u Nemačkoj (današnjem Vroclavu u Poljskoj). Njegov otac, Gustav Born, bio je poznati anatom i embriolog. Majka Margareta poticala je iz bogate porodice industrijalaca. Born se 1901. godine upisao na studije i to na Univerzitet u Breslauu ali je studirao i na drugim univerzitetima. Tako je 1902. godinu proveo na univerzitetu u Hajdelbergu, a 1903. u Cirihu. Zatim odlazi na čuveni univerzitet u Getingenu, gde pohađa predavanja velikih matematičara Hilberta (David Hilbert), Minkovskog (Herman Minkowski), Klajna (Felix Klein), Rungea (Carl Runge). Kasnije će, posle položenog doktorata, kratko boraviti i u Kembridžu, gde će eksperimentalnu fiziku izučavati kod Larmora i Tomsona. Born zatim počinje istraživanja iz teorije relativnosti (o relativističkom elektronu), posle čega dobija mesto u Getingenu. Dalje se bavi vibracijama atoma u kristalnoj rešetki i o tome izdaje i knjigu *Dinamika kristalne rešetke,* 1915. godine. Početkom Prvog svetskog rata (1914), postaje profesor na Univerzitetu u Berlinu, gde će mu kolege biti Plank, Nernst, Ajnštajn, koji će mu postati i prijatelj (zajedno će svirati, Ajnštajn violinu a Born klavir). Born napušta Berlin 1919. kada prelazi u Frankfurt na Majni, gde se zadržava samo dve godine, a 1921. prelazi u Getingen kao profesor ali i direktor Instituta za fiziku. U Getingenu provodi sledećih dvanaest godina. Radi zajedno sa Hajzenbergom i Jordanom na formulisanju principa matrične, kvantne mehanike. Po uspostavljanju Šredingerove talasne mehanike povezuje talasnu funkciju sa gustinom verovatnoće i tako postavlja statističku interpretaciju kvantne mehanike. Za istraživanja u kvantnoj mehanici a naročito za njenu interpretaciju dobija, 1954. godine, Nobelovu nagradu za fiziku.

Nakon dolaska nacionalsocijalista na vlast 1933. godine, Max Born napušta Nemačku. Kraće vreme provodi u Kembridžu i Indiji, gde radi sa C. V. Ramanom. Konačno se zadržava u Edinburgu u Škotskoj, kao profesor teorijske fizike. U naučnom radu ponovo se vraća proučavanju dinamike kristalne rešetke.

Godine 1953. vraća se u Nemačku i nastanjuje blizu Getingena u Bad Pirmontu. Umro je 1970. godine. Na nadgrobnom spomeniku na Getingenskom groblju, gde je sahranjen, stoji uklesana relacija $i(pq-qp)=\hbar/2\pi$.

9. ATOM – KVANTNOMEHANIČKA SLIKA

9.1 ATOM VODONIKA

9.1.1 Transformacija koordinata

Šredingerova (diferencijalna) jednačina analitički može da se reši samo za jednoelektronske sisteme kao što su atom vodonika, jonizovani atomi i molekuli (H_2^+) koji u svom omotaču imaju samo jedan elektron. Sam Šredinger je na primeru atoma vodonika ispitivao valjanost jednačine opšteg tipa koju je predložio. O ovom svom radu Šredinger kaže: *„U ovom prilogu želeo bih da prvo na najprostijem primeru, primeru vodonikovog atoma, pokažem da uobičajeni kvantni uslovi nastaju iz drukčijih potreba i zahteva u kojima nema unapred reči o 'celim brojevima'. Celobrojnost se javlja kao prirodna posledica određenih zahteva slično 'celobrojnosti' čvornih tačaka žice koja osciluje*."

Proučavanje strukture vodonikovog atoma od najvećeg je značaja za razvoj fizičkih teorija atoma i molekula. Prva jednačina kojom je mogao da se proračuna talasni broj spektralne serije, bila je tzv. Balmerova formula primenjena na zračenje vodonikovog atoma. Stara kvantna teorija počinje Borovim atomskim modelom, čiji je najveći uspeh bio baš primena na vodonikov atom. Rešavanjem Šredingerove jednačine vodonikovog atoma, odnosno određivanjem energije i talasnih funkcija dokazano je to da je Šredingerova jednačina tačna jednačina, čime je stvorena osnova i za određivanje strukture višelektronskih sistema (atoma, molekula), kvantnomehaničkim putem, primenom metoda razvijenih u matematici za približno rešavanje diferencijalnih jednačina.

Sada ćemo razmotriti rešavanje Šredingerove jednačine atoma vodonika. Atom vodonika sastoji se iz dve čestice, elektrona i protona (jezgra), između kojih je rastojanje *r*. Koordinate elektrona u pravouglom koordinatnom sistemu označavaju se sa *(x, y, z)*, a koordinate jezgra sa *(X, Y, Z)*. Potencijalna energija *U* je Kulonova i iznosi:

$$U = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\sqrt{(x-X)^2+(y-Y)^2+(z-Z)^2}}. \tag{9.1.1}$$

Ze^2 u brojiocu ukazuje na to da je razmatranje prošireno na sve jednoelektronske atome (jone). Izraz u imeniocu jednačine (9.1.1) jednak je rastojanju elektrona od jezgra r. Šredingerova jednačina za ovaj sistem glasi:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right)\psi-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi- \tag{9.1.2}$$

$$-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2\psi}{\sqrt{(x-X)^2+(y-Y)^2+(z-Z)^2}} = E\psi.$$

U jednačini (9.1.2) m označava masu elektrona, a M je masa jezgra, dok je E ukupna energija sistema. Talasna funkcija ψ je funkcija svih šest koordinata jezgra i elektrona. Diferencijalne jednačine ovog tipa rešavaju se metodom razdvajanja promenljivih [videti odeljak (8.6.2)], što dovodi do „rastavljanja" diferencijalne jednačine, u kojoj funkcije i njeni izvodi zavise od više promenljivih, na više jednodimenzionih problema. Može se pokazati to da metoda razdvajanja promenljivih primenjena na jednačinu (9.1.2), zbog korena u imeniocu, ne uprošćava jednačinu. Zbog toga moramo prethodno transformisati koordinate tako što ćemo koordinate jezgra *(X, Y, Z)* i koordinate elektrona *(x, y, z)* prevesti u relativne koordinate elektrona u odnosu na jezgro (x_r, y_r, z_r) i koordinate centra mase (x_0, y_0, z_0). Pri tome koristimo odranije poznate jednačine koje daju vezu između koordinata centra mase i koordinata jezgra i elektrona (videti poglavlje 4):

$$\begin{aligned}
MX+mx &= (M+m)x_0 \Leftrightarrow x_0 = \frac{M}{m+M}X+\frac{m}{m+M}x\\
MY+my &= (M+m)y_0 \Leftrightarrow y_0 = \frac{M}{m+M}Y+\frac{m}{m+M}y\\
MZ+mz &= (M+m)z_0 \Leftrightarrow z_0 = \frac{M}{m+M}Z+\frac{m}{m+M}z
\end{aligned} \tag{9.1.3}$$

kao i jednačine kojima su definisane relativne koordinate elektrona u odnosu na jezgro:

$$x-X = x_r \qquad y-Y = y_r \qquad z-Z = z_r.$$

Odredićemo sada potrebne diferencijalne operatore:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial X} &= \frac{\partial x_0}{\partial X}\frac{\partial}{\partial x_0}+\frac{\partial x_r}{\partial X}\frac{\partial}{\partial x_r} = \frac{M}{M+m}\frac{\partial}{\partial x_0}-\frac{\partial}{\partial x_r};\\
\frac{\partial^2}{\partial X^2} &= \frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{\partial}{\partial X}\right) = \left(\frac{\partial x_0}{\partial X}\frac{\partial}{\partial x_0}+\frac{\partial x_r}{\partial X}\frac{\partial}{\partial x_r}\right)\left(\frac{M}{M+m}\frac{\partial}{\partial x_0}-\frac{\partial}{\partial x_r}\right) \Leftrightarrow\\
\frac{\partial^2}{\partial X^2} &= \left(\frac{M}{M+m}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}-\frac{2M}{M+m}\frac{\partial}{\partial x_0}\frac{\partial}{\partial x_r}+\frac{\partial^2}{\partial x_r^2}.
\end{aligned} \tag{9.1.4}$$

Prethodna jednačina dobijena je uzimajući u obzir da je:

$$\frac{\partial x_0}{\partial X} = \frac{M}{M+m}; \qquad \frac{\partial x_r}{\partial X} = -1\cdot$$

Takođe, važi:

$$\frac{\partial y_0}{\partial Y} = \frac{M}{M+m}; \qquad \frac{\partial y_r}{\partial Y} = -1$$

$$\frac{\partial z_0}{\partial Z} = \frac{M}{M+m}; \qquad \frac{\partial z_r}{\partial Z} = -1$$

pa jednačine analogne izrazu (9.1.4) glase:

$$\frac{\partial^2}{\partial Y^2} = \left(\frac{M}{M+m}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} - \frac{2M}{M+m}\frac{\partial^2}{\partial y_0 \partial y_r} + \frac{\partial^2}{\partial y_r^2} \tag{9.1.5}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial Z^2} = \left(\frac{M}{M+m}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial z_0^2} - \frac{2M}{M+m}\frac{\partial^2}{\partial z_0 \partial z_r} + \frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\cdot \tag{9.1.6}$$

Na isti način izračunato je:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial x_0}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x_0} + \frac{\partial x_r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x_r} = \frac{m}{M+m}\frac{\partial}{\partial x_0} + \frac{\partial}{\partial x_r};$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) = \left(\frac{\partial x_0}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x_0} + \frac{\partial x_r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x_r}\right)\left(\frac{m}{M+m}\frac{\partial}{\partial x_0} + \frac{\partial}{\partial x_r}\right) \Leftrightarrow$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left(\frac{m}{M+m}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{2m}{M+m}\frac{\partial}{\partial x_0}\frac{\partial}{\partial x_r} + \frac{\partial^2}{\partial x_r^2}\cdot \tag{9.1.7}$$

Odgovarajući izrazi za ostale koordinate glase:

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \left(\frac{m}{M+m}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} + \frac{2m}{M+m}\frac{\partial}{\partial y_0}\frac{\partial}{\partial y_r} + \frac{\partial^2}{\partial y_r^2} \tag{9.1.8}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \left(\frac{m}{M+m}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial z_0^2} + \frac{2m}{M+m}\frac{\partial}{\partial z_0}\frac{\partial}{\partial z_r} + \frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\cdot \tag{9.1.9}$$

Jednačine (9.1.7), (9.1.8) i (9.1.9) dobijene su uzimajući da je:

$$\frac{\partial x_0}{\partial x} = \frac{m}{M+m}; \qquad \frac{\partial x_r}{\partial x} = 1$$

$$\frac{\partial y_0}{\partial y} = \frac{m}{M+m}; \qquad \frac{\partial y_r}{\partial y} = 1$$

$$\frac{\partial z_0}{\partial z} = \frac{m}{M+m}; \qquad \frac{\partial z_r}{\partial z} = 1\cdot$$

Diferencijalni operatori predstavljeni jednačinama od (9.1.4) do (9.1.9) uvrste se u Šredingerovu jednačinu (9.1.2), koja posle ove zamene dobija oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\left(\frac{M}{M+m}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_r^2}+\left(\frac{M}{M+m}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial y_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_r^2}+\left(\frac{M}{M+m}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial z_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\right]\psi -$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{m}{M+m}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_r^2}+\left(\frac{m}{M+m}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial y_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_r^2}+\left(\frac{m}{M+m}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial z_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\right]\psi -$$
$$-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\sqrt{x_r^2+y_r^2+z_r^2}}\psi = E\psi\cdot$$

Posle sređivanja prethodne jednačine dobija se jednostavniji oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_0^2}\right)\psi-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\right)\psi -$$
$$-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\sqrt{x_r^2+y_r^2+z_r^2}}\psi = E\psi \tag{9.1.10}$$

gde je μ redukovana masa (videti poglavlje 4.2).

Funkcija ψ koja se pojavljuje u jednačini (9.1.10), funkcija je koordinata centra mase (x_0, y_0, z_0) i relativnih koordinata elektrona u odnosu na jezgro (x_r, y_r, z_r). Da bi se jednačina (9.1.10) uprostila (rastavila na jednostavnije činioce), primenjuje se metoda razdvajanja promenljivih. Funkcija ψ koja zavisi od šest promenljivih, napiše se sada kao proizvod dve funkcije od kojih svaka zavisi samo od tri promenljive:

$$\psi(x_0, y_0, z_0; x_r, y_r, z_r) = \psi_1(x_0, y_0, z_0)\cdot\psi_2(x_r, y_r, z_r). \tag{9.1.11}$$

Kada se izraz (9.1.11) zameni u (9.1.10) dobija se:

$$-\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\psi_2\left(\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_0^2}\right)\psi_1-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_1\left(\frac{\partial^2}{\partial x_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\right)\psi_2 -$$
$$-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\sqrt{x_r^2+y_r^2+z_r^2}}\psi_1\psi_2 = E\psi_1\psi_2\cdot \tag{9.1.12}$$

Jednačinu (9.1.12) ćemo podeliti sa $\psi_1\psi_2$ posle čega se dobija:

$$-\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\frac{1}{\psi_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_0^2}\right)\psi_1-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\right)\psi_2 -$$

$$-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\sqrt{x_r^2+y_r^2+z_r^2}} = E\cdot \tag{9.1.13}$$

Prvi član jednačine (9.1.13) zavisi od koordinata (x_0, y_0, z_0), drugi i treći član zavise od (x_r, y_r, z_r), a njihov zbir jednak je konstanti. Ovo je moguće samo ako je svaki sabirak stalan. Zbog toga se ukupna energije E predstavlja kao zbir dve konstante E_1 i E_2:

$$E = E_1 + E_2. \tag{9.1.14}$$

Uz ovu smenu jednačina (9.1.13) rastavlja se na dve. Prva jednačina glasi:

$$-\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\frac{1}{\psi_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_0^2}\right)\psi_1 = E_1 \Leftrightarrow$$
$$-\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_0^2}\right)\psi_1 = E_1\psi_1\ . \tag{9.1.15}$$

Druga jednačina je:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\right)\psi_2-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\sqrt{x_r^2+y_r^2+z_r^2}} = E_2 \Leftrightarrow$$
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\right)\psi_2-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\sqrt{x_r^2+y_r^2+z_r^2}}\psi_2 = E_2\psi_2\cdot \tag{9.1.16}$$

Jednačinom (9.1.15) opisuje se slobodno (translatorno) kretanje čestice mase $(M+m)$. Ova jednačina može da se, metodom razdvajanja promenljivih, rastavi na tri jednačine i to uvođenjem smene:

$$\psi_1 = \psi_1^*(x_0)\cdot\psi_2^*(y_0)\cdot\psi_3^*(z_0) \tag{9.1.17}$$

gde smo zvezdicom označili neke nove funkcije od kojih svaka zavisi samo od jedne promenljive (zvezdicom obično obeležavamo funkciju konjugovano kompleksnu funkciji ψ). Zamenom (9.1.17) u (9.1.15) uz uslov:

$$E_1 = E_1^* + E_2^* + E_3^* \tag{9.1.18}$$

dobija se sistem od tri diferencijalne jednačine, sa po jednom nezavisno promenljivom:

$$-\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\frac{d^2\psi_1^*}{dx_0^2} = E_1^*\psi_1^*;\quad -\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\frac{d^2\psi_2^*}{dy_0^2} = E_2^*\psi_2^*;$$
$$-\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\frac{d^2\psi_3^*}{dz_0^2} = E_3^*\psi_3^*\cdot \tag{9.1.19}$$

Rešenja ovih jednačina poznata su odranije – to su funkcije De Broljijevih talasa oblika npr. za ψ_1^*:

$$\psi_1^* = C_1 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2(M+m)E}x_0\right\} + C_2 \exp\left\{\frac{-i}{\hbar}\sqrt{2(M+m)E}x_0\right\}. \quad (9.1.20).$$

Rešenja ψ_2^* i ψ_3^* analognog su oblika kao (9.1.20), a ukupno rešenje jednako je proizvodu ψ_1^*, ψ_2^* i ψ_3^*. Još jednom istaknimo da je energija E_1 iz jednačine (9.1.18) doprinos energiji atoma vodonika zbog slobodnog (translatornog) pomeranja atoma. U skladu s tim, vrednost energije E_1 nije kvantovana. Struktura energijskih nivoa vodonika, očigledno, biće određena Kulonovim potencijalom. Odgovori na pitanja koja su energijska stanja atoma vodonika i kakve su talasne funkcije, dobijaju se rešavanjem Šredingerove jednačine (9.1.16).

9.1.2 Transformacija pravouglih (Dekartovih) u sferne koordinate

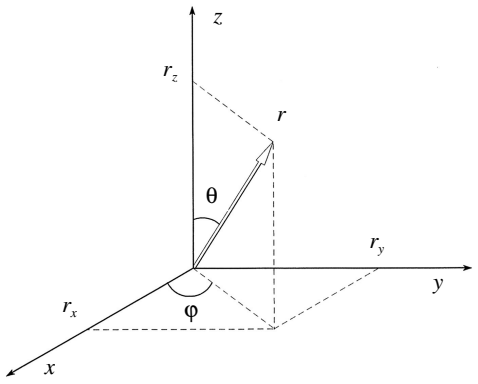
Jednačinu (9.1.16), koja predstavlja Šredingerovu jednačinu u Dekartovim koordinatama za vodonikov atom, napisaćemo izostavljanjem indeksa 2 uz funkciju ψ, u obliku:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\psi = E\psi$$

pri čemu je u izrazu za Kolunov potenicjal, vrednost kvadratnog korena zamenjena relativnom koordinatnom r – rastojanja elektrona od jezgra:

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}. \quad (9.1.21)$$

Radi jednostavnosti pisanja, izostavljena je oznaka r u indeksu koordinata. Može se pokazati da promenljive u diferencijalnoj jednačini (9.1.16) zbog faktora (9.1.21) ne mogu da se razdvoje. Pošto se Kulonov potencijal odlikuje sfernom simetrijom, problem se rešava prevođenjem jednačine (9.1.16) u sferne koordinate.



Slika 9.1.1 Veza između Dekartovog i sfernog koordinatnog sistema.

Veza između sfernih koordinata r, θ i φ i Dekartovih koordinata *x, y* i *z*, Slika (9.1.1) je sledeća:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi \qquad r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \qquad 0 \le r \le \infty ; \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi \qquad \varphi = arc\ tg\left(\frac{y}{x}\right) \qquad 0 \le \varphi \le 2\pi ; \\ z &= r\cos\theta \qquad \theta = arc\ tg\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z} \qquad 0 \le \theta \le \pi . \end{aligned} \tag{9.1.22}$$

Sada treba da odredimo operator $\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ u sfernim koordinatama. Ovu transformaciju vršimo na sledeći način – uzmimo npr. $\partial\psi/\partial x$:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{\partial\psi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial x}. \tag{9.1.23}$$

Potrebno je, dakle, da se odrede izvodi sfernih koordinata po Dekartovim koordinatama:

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{1}{2}(x^2+y^2+z^2)^{-\frac{1}{2}}\cdot 2x = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\varphi ; \\ \frac{\partial\theta}{\partial x} &= \frac{1}{1+\dfrac{x^2+y^2}{z^2}}\cdot\frac{1}{2z}\cdot\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}}\cdot 2x = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r} ; \\ \frac{\partial\varphi}{\partial x} &= -\frac{1}{1+\dfrac{y^2}{x^2}}\cdot\frac{y}{x^2} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} . \end{aligned}$$

Na sličan način izvode se i ostale jednačine, pa se dobija:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial r}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi, \frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}, \ \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}; \\ &\frac{\partial r}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi, \ \frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}, \ \frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}; \\ &\frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta, \ \frac{\partial\theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}, \frac{\partial\varphi}{\partial z} = 0. \end{aligned} \tag{9.1.24}$$

Koristeći jednačine (9.1.24), nalazi se da je:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi};$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}; \qquad (9.1.25)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}.$$

Drugi izvodi po Dekartovim koordinatama transformišu se u druge izvode po sfernim koordinatama na sledeći način:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) =$$

$$= \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) =$$

$$= \sin\theta\sin\varphi\left[\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial r\partial\theta} - \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \right.$$

$$\left. + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial r\partial\varphi} - \frac{\cos\varphi}{r^2\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right] + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\left[\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial r\partial\theta} + \cos\theta\sin\varphi\frac{\partial\psi}{\partial r} + \right.$$

$$\left. + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} - \frac{\sin\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi\partial\theta} - \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r\sin^2\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right] +$$

$$+ \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\left[\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial r\partial\varphi} + \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial r} + \right.$$

$$\left. + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi\partial\theta} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right].$$

Sličnim izračunavanjem nalaze se i izrazi za $\partial^2\psi/\partial x^2$ i $\partial^2\psi/\partial z^2$, pa je:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{ctg\theta}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}. \qquad (9.1.26)$$

Kako je:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{ctg\theta}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = \frac{1}{r^2\sin\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \cos\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) = \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)$$

sledi:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}. \qquad (9.1.27)$$

Drugi pogodan oblik dobija se ako se uoči da je:

$$\frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2} = \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial(r\psi)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\psi}{\partial r} + \psi\right) = r\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + 2\frac{\partial\psi}{\partial r} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}. \tag{9.1.28}$$

9.1.3 Razdvajanje promenljivih u Šredingerovoj jednačini za vodonikov atom i za sisteme slične vodoniku

Šredingerova jednačina u sfernim koordinatama za jednoelektronski sistem glasi:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right)\psi = 0. \tag{9.1.29}$$

Metod razdvajanja promenljivih, koji smo koristili i do sada, upotrebićemo za rešavanje jednačine (9.1.29) u kojoj funkcija zavisi sada od tri promenljive, r, θ i φ. Rešenje jednačine (funkcija ψ) predstavićemo u obliku proizvoda tri funkcije od kojih svaka zavisi samo od jedne promenljive. Nameravamo da ovim postupkom jednačinu (9.1.29) rastavimo na tri prostije diferencijalne jednačine u kojima odgovarajuće funkcije zavise samo od jedne promenljive. Za početak uvode se dve funkcije $R(r)$ i $S(\theta,\varphi)$:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot S(\theta, \varphi). \tag{9.1.30}$$

Tada je:

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = S\frac{dR}{dr}, \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} = R\frac{\partial^2 S}{\partial\varphi^2}, \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} = R\frac{\partial^2 S}{\partial\theta^2}.$$

Uvrštavajući (9.1.30), kao i izračunate izvode, u (9.1.29) i množeći dobijenu jednačinu sa $r^2/(RS)$ dobija se:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}Z\frac{e^2}{r}\right)r^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{1}{S}\frac{\partial^2 S}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{1}{S}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial S}{\partial\theta}\right) = 0. \tag{9.1.31}$$

Leva strana jednačine (9.1.31) sastoji se iz dva člana od kojih je jedan funkcija samo r koordinate, a drugi je funkcija samo koordinata θ i φ. Pošto je njihov zbir jednak nuli, mogu da se izjednače sa konstantama iste apsolutne vrednosti, ali suprotnog znaka. Ovu konstantu obeležićemo sa f. Tada se jednačina (9.1.31) rastavlja na dve:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right)r^2 = +f \tag{9.1.32}$$

$$\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{1}{S}\frac{\partial^2 S}{\partial\varphi^2}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{1}{S}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial S}{\partial\theta}\right) = -f. \tag{9.1.33}$$

Zatim se na jednačinu (9.1.33) ponovo primeni metod razdvajanja promenljivih. Funkciju $S(\theta,\varphi)$ prikazaćemo kao proizvod dve nove funkcije, $\Theta(\theta)$ i $\Phi(\varphi)$ od kojih svaka zavisi samo od jedne promenljive:

$$S(\theta,\varphi) = \Phi(\varphi)\cdot\Theta(\theta). \tag{9.1.34}$$

Uzimajući u obzir da je:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial\varphi^2} = \Theta\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}; \quad \frac{\partial S}{\partial\theta} = \Phi\frac{d\Theta}{d\theta}$$

a zatim uvrštavanjem izvoda (9.1.34) u (9.1.33), dobija se, posle množenja sa $\sin^2\theta$:

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+f\sin^2\theta = 0. \tag{9.1.35}$$

Prvi član jednačine (9.1.35) zavisi samo od φ, a drugi i treći zavise od θ. Izjednačavanjem prvog člana jednačine (9.1.35) sa konstantom $-m^2$, a zbira drugog i trećeg mora biti $+m^2$, tako da je ukupan zbir sva tri člana nula dobijaju se dve diferencijalne jednačine:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+m^2\Phi = 0 \tag{9.1.36}$$

odnosno:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(f-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0. \tag{9.1.37}$$

Prema tome, problem rešavanja Šredingerove jednačine za atom vodonika svodi se na rešavanje tri obične diferencijalne jednačine, jedne radijalne (9.1.32) i dve ugaone, po φ (9.1.36) i po θ (9.1.37).

9.1.4 Rešavanje ugaone Šredingerove jednačine (po φ)

Rešenje jednačine (9.1.36):

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+m^2\Phi = 0$$

potražićemo u obliku:

$$\Phi = Ne^{\alpha\varphi}$$

(N je konstanta normiranja). Tada je:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = N\alpha^2 e^{\alpha\varphi}$$

pa se uvrštavanjem u (9.1.36) dobija karakteristična (kvadratna) jednačina:

$$\alpha^2 + m^2 = 0; \quad \Rightarrow \quad \alpha = \pm i|m|, \quad \alpha = im$$

pri čemu je dozvoljeno da m ima i pozitivne i negativne vrednosti. Dakle, rešenje jednačine (9.1.36) je:

$$\Phi = Ne^{im\varphi}.$$

Kako talasna funkcija mora da bude jednoznačna (što u ovom slučaju znači da njena vrednost za uglove φ i $\varphi + 2k\pi$ mora da bude ista), mora da bude ispunjen i uslov:

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi + 2\pi)} = e^{im\varphi} \cdot e^{2\pi im}$$

odakle sledi:

$$1 = i \cdot \sin 2m\pi + \cos 2m\pi; \quad \Rightarrow \quad \sin 2m\pi = 0; \quad \cos 2m\pi = 1$$

što je ispunjeno samo kada je m ceo broj. Dakle:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Vrednost konstante normiranja N nalazimo iz uslova:

$$\int_0^{2\pi} \Phi^* \cdot \Phi d\varphi = 1; \quad \int_0^{2\pi} (Ne^{im\varphi})^* \cdot Ne^{im\varphi} d\varphi = 1$$

ili posle integraljenja:

$$N^2 \cdot 2\pi = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Prema tome, rešenje Šredingerove jednačine (9.1.36) je kompleksna funkcija:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \tag{9.1.38}$$

9.1.5 Rešavanje ugaone Šredingerove jednačine (po θ)

Jednačina (9.1.37):

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(f-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0$$

uvođenjem smene: $x = \cos\theta$ svodi se na oblik:

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right]+\left(f-\frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0 \qquad (9.1.39)$$

jer je:

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d}{dx}\frac{dx}{d\theta} = -\sin\theta\frac{d}{dx}.$$

Rešenje diferencijalne jednačine (9.1.39) tražimo u obliku:

$$\Theta = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\cdot u(x) \qquad (9.1.40)$$

pri čemu funkciju $u(x)$ treba odrediti. Potražićemo $d\Theta/dx$ i zajedno sa Θ zameniti u (9.1.39). Posle sređivanja i skraćivanja sa $(1-x^2)^{m/2}$ dobija se jednačina koju treba da zadovoljava funkcija $u(x)$:

$$(1-x^2)u'' - 2(|m|+1)\cdot x\cdot u' + (f-|m|-m^2)\cdot u = 0;\quad u'\equiv\frac{du}{dx};\quad u''\equiv\frac{d^2u}{dx^2}. \qquad (9.1.41)$$

Diferencijalnu jednačinu (9.1.41) nećemo direktno rešavati nego ćemo pokazati kako se polazeći od određene funkcije, njenim diferenciranjem, dobija diferencijalna jednačina po obliku identična našoj čije rešenje tražimo. Uvodimo prvo funkciju:

$$y = (x^2-1)^l \qquad (9.1.42)$$

pri čemu je l ceo, pozitivan broj. Logaritmovanjem i diferenciranjem po x dobija se iz (9.1.42):

$$(1-x^2)y' + 2lxy = 0.$$

Ako se ova jednačina $(k+1)$ puta diferencira po x i ako se uvede oznaka:

$$z = \frac{d^k y}{dx^k} = \frac{d^k(x^2-1)^l}{dx^k} \qquad (9.1.43)$$

dobija[12] se nova (diferencijalna) jednačina koja glasi:

$$(1-x^2)z'' - 2(k-l+1)xz' + (2l-k)\cdot(k+1)z = 0 \qquad (9.1.44)$$

i koja je identična sa jednačinom (9.1.41), kada je:

$$u = c'z; \quad |m|+1 = k-l+1; \quad (2l-k)\cdot(k+1) = f-|m|-m^2 \qquad (9.1.45)$$

gde c' može da bude neka proizvoljna konstanta. Iz (9.1.45) sledi:

$$k = l+|m| \quad \text{i} \quad f = l(l+1). \qquad (9.1.46)$$

Uzimajući u obzir (9.1.45) i (9.1.46) konačno dobijamo funkciju $u(x)$:

$$u(x) = c'\frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}(x^2-1)^l. \qquad (9.1.47)$$

Uvrštavanjem (9.1.47) u (9.1.40) dobija se rešenje ugaone Šredingerove jednačine po θ:

$$\Theta(\theta) = c'(1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\cdot\frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}(x^2-1)^l; \quad x\equiv\cos\theta. \qquad (9.1.48)$$

U matematici se funkcije tipa (9.1.48) nazivaju pridruženi Ležanrovi (Legendre) polinomi, pa rešenje ugaone Šredingerove jednačine može da se napiše i u obliku:

$$\Theta(\theta) = NP_l^m(x) = NP_l^m(\cos\theta) \qquad (9.1.48a)$$

pri čemu su sa P_l^m označeni pridruženi Ležanrovi polinomi, dok je N konstanta normiranja u koju je uključena konstanta c'. Pridruženi Ležanrovi polinomi definišu se kao:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}(1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}(x^2-1)^l$$

gde su sa $P_l(x)$ označeni Ležanrovi polinomi:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l.$$

[12] Pri tom se koristi binomni obrazac: $\frac{d^n}{dx^n}(uv) = \left(\frac{d^n u}{dx^n}\right)v + n\left(\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}\right)\frac{dv}{dx} + \ldots$

Naglasimo da l može da ima samo celobrojne vrednosti i da je $|m| \le l$ - kada bi l bilo manje od $|m|$, izraz (9.1.48) bi postao nula. Za dato l postoji $(l + 1)$ rešenja koja odgovaraju sledećim vrednostima $|m|$:

$$|m| = 0, l, 2\ldots, l. \tag{9.1.49}$$

Vrednost konstante normiranja može se odrediti iz uslova:

$$\int_0^{\pi} \Theta^{*} \Theta \sin\theta d\theta = 1$$

i ona iznosi:

$$N_\theta = \sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}$$

pa je $\Theta(\theta)$ konačno:

$$\Theta(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos\theta); \quad |m| \le l. \tag{9.1.48b}$$

9.1.6 Rešavanje radijalne Šredingerove jednačine

Preuređivanjem, množenjem sa R/r^2 i uvrštavanjem $f = l(l+1)$, radijalna jednačina dobija oblik:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[A + 2\frac{B}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0 \tag{9.1.50}$$

pri čemu uvodimo oznake:

$$A = \frac{2\mu E}{\hbar^2}; \quad B = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mu Z e^2}{\hbar^2}. \tag{9.1.51}$$

Odredićemo prvo rešenje asimptotskog oblika jednačine (9.1.50) i to u slučaju kada $r \to \infty$. Tada članovi koji sadrže $1/r$ i $1/r^2$ postaju jednaki nuli, pa se jednačina (9.1.50) svodi na znatno prostiju diferencijalnu jednačinu:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + AR = 0. \tag{9.1.52}$$

Rešenja diferencijalne jednačine (9.1.52) lako se nalaze i ona su oblika:

$$R(r) = C_1 e^{\sqrt{-A}r} + C_2 e^{\sqrt{-A}r} \tag{9.1.53}$$

gde su C_1 i C_2 proizvoljne konstante. U eksponentu jednačine (9.1.53) javlja se $\sqrt{-}Ar$. Znak „-" uz A potreban je da bi kvadratni koren bio realan broj, jer je konstanta A, proporcionalna energiji, pa ima negativnu vrednost. Imajući na umu da talasna funkcija mora da bude konačna za sve vrednosti r, pa i za $r \to \infty$, izabraćemo $C_1 = 0$. Stavljajući da je $C_2 = C$, dobija se:

$$R(r) = Ce^{\sqrt{-A}r}. \tag{9.1.53a}$$

Opšte rešenje jednačine (9.1.50) dobija se korišćenjem izraza (9.1.53a) ako se C shvati kao funkcija r. Uvodimo sada novu promenljivu:

$$\rho = 2\sqrt{-A}r.$$

Uzimajući u obzir da je:

$$\frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr}\frac{d}{d\rho} = 2\sqrt{-A}\frac{d}{d\rho}; \quad \frac{d^2}{dr^2} = \left(\frac{d\rho}{dr}\right)^2\frac{d^2}{d\rho^2} = -4A\frac{d^2}{d\rho^2}$$

jednačinu (9.1.50) transformišemo i izražavamo po novoj promenljivoj ρ:

(9.1.50a) $$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{-A}}\frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0.$$

Zatim rešenje predstavljamo u obliku:

$$R(\rho) = C(\rho)e^{-\frac{\rho}{2}} \tag{9.1.54}$$

pa se zamenom (9.1.54) i odgovarajućih izvoda u (9.1.50a), dobija jednačina koju mora da zadovljava funkcija $C(\rho)$:

$$\frac{d^2C}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right)\frac{dC}{d\rho} + \left[\left(\frac{B}{\sqrt{-A}} - 1\right)\frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]C = 0. \tag{9.1.55}$$

Rešenje ove jednačine tražimo u obliku reda[13]

$$C(\rho) = \sum_{\nu} a_\nu \rho^{\nu+s}; \quad a_0 \neq 0. \tag{9.1.56}$$

Iz (9.1.56) sledi:

[13] U jednačini (9.1.55) javljaju se singulariteti $1/\rho$ i $1/\rho^2$ pri $\rho = 0$. Zato se funkcija C(p) predstavlja potencijalnim redom koji počinje članom ρ^s, pri čemu će broj $s > 0$ biti određen zahtevom da talasna funkcija bude konačna kada $\rho \to 0$.

$$\frac{dC(\rho)}{d\rho}=\sum_{\nu}(\nu+s)a_\nu\rho^{\nu+s-1};\quad \frac{d^2C(\rho)}{d\rho^2}=\sum_{\nu}(\nu+s)(\nu+s-1)a_\nu\rho^{\nu+s-2}. \tag{9.1.57}$$

Uvrštavajući (9.1.56) i (9.1.57) u (9.1.55) dobija se:

$$\sum_{\nu}\{(\nu+s)(\nu+s-1)a_\nu\rho^{\nu+s-2}+2(\nu+s)a_\nu\rho^{\nu+s-2}-(\nu+s)a_\nu\rho^{\nu+s-1}+ \tag{9.1.58}$$

$$+\left(\frac{B}{\sqrt{-A}}-1\right)a_\nu\rho^{\nu+s-1}-l(l+1)a_\nu\rho^{\nu+s-2}\}=0.$$

Da bi bila zadovoljena jednakost (9.1.58), koeficijenti uz sve stepene uz ρ moraju da budu jednaki nuli. Iz uslova da je koeficijent uz najniži stepen od ρ, ρ^{s-2} jednak je nuli, dobija se:

$$s(s-1)a_0+2sa_0-l(l+1)a_0=0 \quad \Rightarrow \quad s^2+s-l(l+1)=0$$

odnosno:

$$s=\begin{cases} l \\ -(l+1). \end{cases}$$

Samo prva od dve mogućnosti ($s=l$) daje pozitivne vrednosti za s, pa, prema tome, obezbeđuje konačnost talasne funkcije za $r=0$. Zato ćemo na svakom mestu u (9.1.58) s zameniti sa l. Izjednačavanjem koeficijenata uz stepene $\rho^{\nu+l-1}$ s nulom, dobija se:

$$(\nu+l+1)(\nu+l)a_{\nu+1}+2(\nu+l+1)a_{\nu+1}-(\nu+l)a_\nu+\left(\frac{B}{\sqrt{-A}}-1\right)a_\nu-l(l+1)a_{\nu+1}=0$$

odakle sledi:

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu}=\frac{\nu+l+1-\dfrac{B}{\sqrt{-A}}}{(\nu+l+1)(\nu+l)+2(\nu+l+1)-l(l+1)}. \tag{9.1.59}$$

Jednačina (9.1.59) predstavlja rekurentnu formulu – ona omogućava da se svi koeficijenti reda (9.1.56) izraze preko jednog – npr. a_0. Prema tome, funkcija $R(\rho)$ se do na konstantan faktor može predstaviti u obliku:

$$R(\rho)=e^{-\frac{\rho}{2}}\sum_{\nu}a_\nu\rho^{\nu+l} \quad \text{gde je} \quad \rho=2\sqrt{-A}r. \tag{9.1.60}$$

Usled zahteva da funkcija $R(\rho)$ bude konačna funkcija, polinom $R(\rho)$ **mora** da se prekine posle k-tog člana. Pokazaćemo i zašto. Na osnovu jednačine (9.1.59) sledi:

$$\lim_{\nu\to\infty}\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu}=\frac{1}{\nu}\,. \tag{9.1.61}$$

Analizirajmo sada funkciju e^ρ koja je beskonačna kada $\rho\to\infty$. Kada funkciju e^ρ razvijemo u Mak Lorenov red i izračunamo količnik sukcesivnih članova reda dobijamo:

$$e^\rho=\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{\rho^\nu}{\nu!}=\sum_{\nu=0}^{\infty}b_\nu\rho^\nu\ \Rightarrow\ \frac{b_{\nu+1}}{b_\nu}=\frac{1}{\nu+1}.$$

Upoređivanjem količnika sukcesivnih članova Mak Lorenovog razvoja funkcije e^ρ i našeg reda $R(\rho)$, (9.1.61), zaključujemo da bi beskonačna suma reda $\sum a_\nu\rho^{\nu+l}$ težila baš funkciji e^ρ. U tom slučaju je:

$$R(\rho)=e^{-\frac{\rho}{2}}\cdot e^\rho=e^{\frac{\rho}{2}};\quad \rho\to\infty\ \Rightarrow\ R(\rho)\to\infty$$

dakle, funkcija $R(\rho)$ bi imala beskonačnu vrednost, što nije dozvoljeno. Zbog toga suma $\sum a_\nu\rho^{\nu+l}$ mora da se prekine posle k-tog člana. To istovremeno znači da koeficijent uz (k+1)-vi član reda, a_{k+1} mora da bude jednak nuli. Ako se ovaj uslov unese u rekurentnu formulu (9.1.59) dobija se sledeća jednakost:

$$k+l+1-\frac{B}{\sqrt{-A}}=0. \tag{9.1.62}$$

Kada se zbir pozitivnih, celih brojeva (k+l+1) označi sa n, pri čemu n može da ima vrednosti l+1, l+2, itd. (jer je k+l najmanje nula), dobija se:

$$n=\frac{B}{\sqrt{-A}}$$

ili ako se zamene ranije uvedene oznake za A i B dobija se:

$$E=E_n=-\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{2\pi^2\mu Z^2e^4}{n^2h^2}. \tag{9.1.63}$$

Jednačina (9.1.63) ista je kao i Borova jednačina za energiju vodonikovog atoma (4.2.13). I prema ovoj jednačini vrednosti energije su kvantovane (brojem n). Broj n javlja se u postupku matematičkog rešavanja diferencijalne jednačine kojom opi-

sujemo vodonikov atom, odnosno kao posledica zahteva da talasna funkcija bude konačna. Prema tome, energija vodonikovog atoma može da ima samo diskretne vrednosti, određene jednačinom (9.1.63). Kako sledi iz jednačine (9.1.63), energija zavisi samo od tzv. glavnog kvantnog broja n, a ne od kvantnih brojeva l ili m.

Svakoj energijskoj vrednosti odgovara niz *svojstvenih funkcija* ψ koje odgovaraju različitim vrednostima brojeva l i m. Kako za određeno n, broj l može da ima vrednosti n-1, n-2,..., 0, a za svako l broj može da bude $-l$, $-l$+1, $-l$+2,..., $+l$, dakle, ukupno (2l+1) vrednosti, *degeneracija* energijskog nivoa koji ima glavni kvantni broj n je:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = \frac{n}{2}(1+2n-1) = n^2.$$

U skladu sa svim onim što je rečeno, radijalna funkcija $R(r)$, jednačina (9.1.60) je oblika:

$$R_{nl}(\rho) = N\, e^{\frac{-\rho}{2}} \sum_{\nu=0}^{k} a_\nu \rho^{\nu+l} = N\, e^{\frac{-\rho}{2}} \rho^l \sum_{\nu=0}^{k} a_\nu \rho^\nu;\ \rho = 2\sqrt{-A}\ r \qquad (9.1.64)$$

k je poslednji član reda, $k=n-l-1$. N je konstanta normiranja. Polinom:

$$G(\rho) = \rho^l \sum_{\nu=0}^{k} a_\nu \rho^\nu$$

blisko je povezan sa tzv. *pridruženim Lagerovim* (*Laguerre*) *polinomima* stepena r-s i reda s, koji se definišu kao:

$$L_r^S(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s} L_r(\rho)$$

gde je $L_r(\rho)$, *Lagerov polinom* stepena r:

$$L_r(\rho) = e^\rho \frac{d^r}{d\rho^r} \rho^r e^{-\rho}\ .$$

Može se pokazati da je:

$$G(\rho) = \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

pa rešenje radijalne jednačine može da se napiše u obliku:

$$R_{nl}(\rho) = N_{n,l} e^{-\frac{\rho}{2}} G(\rho) = N_{n,l} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \qquad (9.1.65)$$

gde je $N_{n,l}$ konstanta normiranja.

Znajući definiciju Lagerovih odnosno *pridruženih Lagerovih polinoma*, pokazaćemo kako se određuje radijalna talasna funkcija u slučaju kada je n=1, l=0, m=0. Znači, treba odrediti L_1^1 :

$$L_1 = e^{\rho}\frac{d}{d\rho}(\rho e^{-\rho}) = e^{\rho}(e^{-\rho} - \rho e^{-\rho}) = 1 - \rho;$$

$$L_1^1 = \frac{d}{d\rho}(1 - \rho) = -1 \quad \Rightarrow \quad G(\rho) = \rho^0(-1) = -1 .$$

Radijalna funkcija za n=1 i l=0, ima, dakle, oblik:

$$R_{1,0}(r) = -N_{1,0}e^{-\frac{\rho}{2}}.$$

Konstanta normiranja $N_{1,0}$ određuje se iz uslova:

$$\int_0^{\infty}(R_{1,0})^2 dV = \int_0^{\infty}(R_{1,0})^2 r^2 dr = 1$$

(deo elementa zapremine po r je $r^2\ dr$). Dalje:

$$N^2\int_o^{\infty} e^{-\frac{\rho}{2}}e^{-\frac{\rho}{2}}r^2 dr = N^2\int_0^{\infty} e^{-2\sqrt{-A}r}r^2 dr$$

pa se posle parcijalnog integraljenja dobija:

$$N^2\left\{-\frac{1}{2\sqrt{-A}}r^2 e^{-2\sqrt{-A}r} - \frac{2r}{2\sqrt{-A}}e^{-2\sqrt{-A}r} + \frac{1}{2\cdot 2A^{\frac{3}{2}}}e^{-2\sqrt{-A}r}\right\}\Bigg|_0^{\infty} = 1$$

Posle zamene granica i vraćajući se na definiciju A, jednačina (9.1.51) u kojoj se zamenjuje izraz za energiju vodonikovog atoma, jednačina (9.1.63), dobija se:

$$\frac{1}{4A^{\frac{3}{2}}}N^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad N_{1,0} = -2\left[(-A)^{\frac{1}{2}}\right]^{\frac{3}{2}} \Rightarrow \quad N_{1,0} = -2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}$$

gde je:

$$a_0 = 4\pi\varepsilon_0\frac{\hbar^2}{\mu e^2}. \qquad (9.1.66)$$

Kod vodonikoidnih jona velikog rednog broja Z, kada se može smatrati da je redukovana masa μ jednaka masi elektrona m_e, a_0 odgovara tačno Borovom poluprečniku (dužina od 0,529 Å). Kada se u jednačini:

$$\rho = \sqrt{-A}\ r$$

zameni vrednost za A odnosno za energiju E prema jednačini (9.1.63) i uzme u obzir jednačina (9.1.66) za Borov poluprečnik, dobija se:

$$\rho = \frac{2Z}{n}\frac{r}{a_0} \tag{9.1.67}$$

pa radijalna talasna funkcija za slučaj n=1 i l=0 konačno dobija oblik:

$$R_{1,0}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}. \tag{9.1.68}$$

Radijalne funkcije $R(\rho)$ nose u svom indeksu brojeve n i l, čime je naznačeno da oblik Lagerovog polinoma zavisi od izbora n i l. Naglasimo još jednom, da pri zadatom n, broj l može da uzima vrednosti određenom jednačinom $l \le n-1$.

9.1.7 Atomske orbitale

Talasne funkcije koje se dobijaju rešavanjem Šredingerove jednačine za vodonikov atom imaju oblik:

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)\cdot\Theta_{l,m}(\theta)\cdot\Phi_m(\varphi) \tag{9.1.69}$$

pri čemu je:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \qquad -l \le m \le l \tag{9.1.70}$$

$$\Theta(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}}\frac{1}{2^l l!}(1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\cdot\frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}(x^2-1)^l; \quad x=\cos\theta \tag{9.1.71}$$

$l = n-1, n-2$, itd.

$$R_{n,l}(r) = -\left[\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}L_{n+1}^{2l+1}(\rho) \tag{9.1.72}$$

$$\rho = 2\sqrt{-A}r, \quad A = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad a_0 = 4\pi\varepsilon_0\frac{\hbar^2}{\mu e^2}. \tag{9.1.73}$$

Izraz za a_0 definisan je jednačinom (9.1.66), a funkcionalne veze između ρ i r, odnosno konstante A i energije E, definisane su jednačinama (9.1.60) i (9.1.51). Funk-

cije su normirane na jedinicu tako da koeficijenti ispred pojedinih funkcija označavaju faktore normiranja.

Ispitivanje zavisnosti talasne funkcije od koordinata daje predstavu o verovatnoći nalaženja elektrona u nekoj tački prostora. Tako, za određeni pravac θ i φ, možemo ispitati raspodelu verovatnoće duž radijus vektora povučenog iz jezgra. Samu verovatnoću nalaženja elektrona određuje proizvod kvadrata talasne funkcije $|\psi_{n,l,m}|^2$ i elemenata zapremine dV ili u opštem slučaju $\psi_{n,l,m}\cdot\psi^*_{n,l,m}\,dV$ ($dV = dxdydz = r^2 dr \sin\theta d\theta \cos\varphi\, d\varphi$).

Talasne funkcije pojedinačnih elektrona atoma i molekula nazivaju se **orbitale**. U zavisnosti od vrednosti broja l, orbitale mogu da budu s-tipa (l=0), p-tipa (l=1), d-tipa (l=2), f-tipa (l=3), itd. Ali, pre nego što pređemo na analizu orbitala moramo preciznije utvrditi značenje brojeva n, l i m kojima je određen oblik talasne funkcije ψ.

Kvantni brojevi

Pri rešavanju Šredingerove jednačine za vodonikov atom, javljaju se brojevi ***n***, ***l*** i ***m*** koji su odgovarajuća zamena za kvantne brojeve uvedene u okviru Bor-Somerfeldove teorije. Poznato je, međutim, da su kvantni brojevi u okviru Bor-Somerfeldove teorije, bili uvedeni *ad hoc* (unapred), dok se pri rešavanju Šredingerove jednačine oni javljaju prirodno, kao posledica zahteva da talasna funkcija zadovoljava očigledne fizičke granične uslove.

Na jeziku kvantne mehanike kvantni brojevi su povezani sa svojstvenim vrednostima odgovarajućih operatora. Tako može da se pokaže da broj l zadovoljava jednačinu:

$$\hat{l}^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi$$

a broj m jednačinu:

$$\hat{l}_z\psi = m\hbar\psi$$

pri čemu su $\hat{l}^2$ i $\hat{l}_z$ operatori koji se pomoću pravila kvantne mehanike pridružuju momentu impulsa (ugaonom momentu) i projekciji momenta impulsa na neku izbranu osu z. Navedene jednačine proučićemo podrobnije u odeljku 9.1.8.

s orbitale

Sve orbitale koje imaju nulti orbitni ugaoni moment (l=0) nazivaju se s orbitale. Kod s orbitala podrazumeva se da je i vrednost broja m takođe nula. Uzmimo sada 1s orbitalu. Broj (u ovom slučaju 1) ispred oznake s pokazuje vrednost glavnog kvantnog broja n. 1s orbitala odgovara atomu vodonika u njegovom **osnovnom** stanju – u stanju **najniže** energije (tada je glavni kvantni broj n=1). Ugaoni deo (po φ, θ) talasne funkcije 1s (kao i ostalih s funkcija, 2s, 3s, itd.) jednak je samo faktorima normiranja:

$$\Phi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

videti jednačinu (9.1.37), dok je:

$$\Theta_{1s} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

jer je:

$$N^2\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta = N^2(-\cos\theta)\Big|_0^{\pi} = N^2 2 = 1 \quad \text{pa je} \quad N = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Treba pomenuti to da je deo elementa zapremine po θ jednak $\sin\theta\ d\theta$. Prema jednačini (9.1.69) 1*s* orbitala vodonika je:

$$\psi_{1s} = R_{1s}\cdot\Phi_{1s}\cdot\Theta_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \tag{9.1.74}$$

pri čemu je za R_{1s} uzet izraz prema jednačini (9.1.68).

Na osnovu poznatih izraza za radijalnu funkciju, odnosno za Lagerove i pridružene Lagerove polinome mogu da se izračunaju i druge *s* orbitale:

$$\psi_{2,0,0} = \psi_{2s} = \frac{1}{4}(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(2-\rho)e^{-\frac{\rho}{2}}; \quad \rho = \frac{Zr}{a_0} \tag{9.1.75}$$

$$\psi_{3,0,0} = \psi_{3s} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\ \frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(6-6\rho+\rho^2)e^{-\frac{\rho}{2}}; \quad \rho = \frac{2\dot{Z}r}{3a_0}. \tag{9.1.76}$$

U Tabeli 9.1.1 navedeni su analitički oblici radijalnih funkcija vodonikovog atoma, i to: 1*s*, 2*s*, 3*s*, 4*s*, 2*p*, 3*p*, 4*p*, 3*d* i 4*f* dok su na Slici 9.1.2 ove funkcije (odnosno njihovi kvadrati) prikazani grafički.

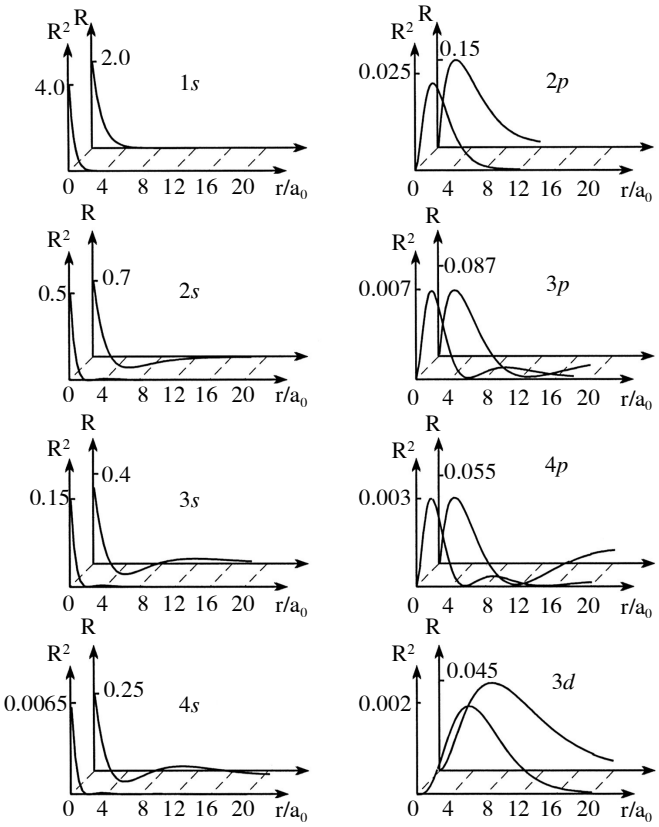
Sve *s* orbitale sferno su simetrične – ne pokazuju zavisnost od uglova θ i φ, što se eksplicitno vidi iz relacija od (9.1.74) do (9.1.76). Orbitala osnovnog stanja (1*s*) eksponencijalno opada sa rastojanjem od jezgra, Slika 9.1.2. Ovo upućuje na zaključak da je najveća gustina verovatnoće nalaženja elektrona u jezgru. Orbitala se prostire, međutim, prilično daleko od jezgra pokazujući to da postoji stvarna verovatnoća nalaženja elektrona i na ovim rastojanjima od jezgra. Talasne funkcije 2*s* i 3*s* slično se ponašaju, s tim što kvadrat talasne funkcije 2*s* ima, pored maksimalne vrednosti pri *r*=0, još jedan maksimum na udaljenosti od $4a_0$ od jezgra. Kvadrat talasne funkcije 3*s* ima dva takva maksimuma pri određenim vrednostima *r*. Ovo ukazuje na to da je na takvim mestima verovatnije naći elektron.

p orbitale

Kod *p* orbitala je orbitni[14] kvantni broj *l*=1, što znači da elektron ima ugaoni moment intenziteta $\sqrt{2}\hbar$. Ako se razmotri radijalni deo *p* orbitale $R_{n,l}$ lako može da se pokaže da je analitički oblik $R_{2,1}$ orbitale:

[14] Zadržavamo naziv „orbitni" kvantni broj, mada na prvi pogled izraz „orbitalni" izgleda primerenije jer Šredingerov formalizam ne koristi pojam „orbite". S druge strane, naziv „orbitalni" kvantni broj kao broj koji definiše tip orbitale nije dovoljno precizan jer može da se odnosi i na glavni i na magnetni kvantni broj, koji, takođe, određuju tip orbitale. Stoga koristimo naziv „orbitni" kvantni broj kao broj koji kvantuje ugaoni moment atoma (elektrona).

$$R_{2,1} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{2\sqrt{6}}\right)\rho e^{-\frac{\rho}{2}} \quad ; \quad \rho = \frac{Zr}{a_0} . \tag{9.1.77}$$



Slika 9.1.2 Radijalne funkcije vodonikovog atoma.

Oblik polinoma po ρ određujemo na osnovu jednačine (9.1.65) i definicije pridruženog Lagerovog i Lagerovog polinoma. Neka je reč o $2p$ orbitali – u tom slučaju je n=2, l=1. Treba, prema tome, odrediti pridruženi Lagerov polinom L^3 kao i Lagerov polinom L_3. Oblik polinoma, odnosno koeficijenti uz stepene polinoma mogu da se odrede i pomoću rekurentne jednačine (9.1.59), uz uslov da polinom:

$$\rho^l(a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + \ldots + a_k\rho^k)$$

mora da se prekine kod k-tog člana. Tako se za $2p$ orbitalu nalazi:

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{a_1}{a_0} = \frac{v+l+1-n}{(v+l+1)(v+l)+2(v+l+1)-l(l+1)} = \frac{0+1+1-2}{\ldots\ldots\ldots} = 0$$

pri čemu se uzima da je v=0, l=1 i n=2. Iz prethodnog izraza sledi da je a_1 polinoma nula, što znači da polinom ima samo član a_0. Dakle:

$$R_{2,1} = N_{2,1}\rho e^{-\frac{\rho}{2}} .$$

Na isti način određuje se polinom po ρ za $3p$ orbitalu:

$$\frac{a_k+1}{a_k} = \frac{a_1}{a_0} = \frac{v+l+1-n}{(v+l+1)(v+l)+2(v+l+1)-l(l+1)} = \frac{0+1+1-3}{2+4-2} = -\frac{1}{4}$$

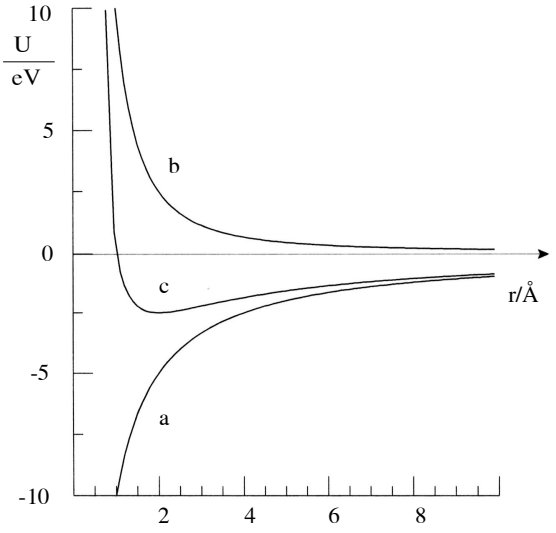
$$\frac{a_2}{a_1} = \frac{1+1+1-3}{6+6-3} = 0.$$

Dakle, polinom, u slučaju $3p$ orbitale, ima oblik:

$$const \cdot \rho(4-\rho) .$$

Radijalna funkcija 3ρ orbitale, zajedno sa konstantom normiranja može da se napiše kao:

$$R_{3,1}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{9\sqrt{6}}(4-\rho)\rho e^{-\frac{\rho}{2}}; \quad \rho = \frac{2Zr}{3a_0}. \tag{9.1.78}$$



Slika 9.1.3 Kada je l=0, potencijalna energija je isključivo Kulonova i sila je privlačna, kriva *a*. Ako elektron ima orbitni moment, kriva potencijalne energije ima drukčiji oblik od Kulonove – naročito u blizini jezgra i sila je tada odbojna, kriva *c*. Ovakav oblik potencijalne energije utiče na vrednost talasne funkcije u blizini jezgra. Kriva *b* pokazuje odbojni potencijal, $U \sim 1/r^2$.

Za razliku od *s* orbitala, kod *p* orbitala (ali i kod ostalih orbitala kod kojih je $l \neq 0$) vrednost talasne funkcije, pa i gustina verovatnoće nalaženja elektrona, u tački r=0 je nula. Na „klasičan" način ovo bi moglo da se rastumači postojanjem sile koja u blizini jezgra na elektron deluje odbojno. I zaista, ako se pogleda jednačina (9.1.50), napisana u nešto izmenjenom obliku:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}R - \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[-\frac{1}{4(\pi\varepsilon_0)}\frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]R = 0.$$

Tabela 9.1.1 Normirane radijalne talasne funkcije za $Z = 1$. $d=r/a_0$ i predstavlja rastojanje u atomskim jedinicama. Za vodonikoidne atome, u opštem slučaju, funkciju treba pomnožiti sa $(Z/a)_0^{3/2}$ a promenljivu d u eksponentu zameniti sa Zr/a_0:

$$R_{1s}(d) = 2e^{-d}$$

$$R_{2s}(d) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{d}{2}}\left(1 - \frac{d}{2}\right)$$

$$R_{3s}(d) = \frac{2}{9\sqrt{3}}e^{-\frac{d}{3}}\left(3 - 2d + \frac{2}{9}d^2\right)$$

$$R_{4s}(d) = \frac{1}{4}e^{-\frac{d}{4}}\left(1 - \frac{3}{4}d + \frac{1}{8}d^2 - \frac{1}{192}d^3\right)$$

$$R_{2p}(d) = \frac{1}{2\sqrt{6}}de^{-\frac{d}{2}}$$

$$R_{3p}(d) = \frac{4}{27\cdot 3\sqrt{6}}de^{-\frac{d}{3}}(6 - d)$$

$$R_{4p}(d) = \frac{1}{16}\sqrt{\frac{5}{3}}de^{-\frac{d}{4}}\left(1 - \frac{1}{4}d + \frac{1}{80}d^2\right)$$

$$R_{3d}(d) = \frac{4}{81\sqrt{30}}d^2e^{-\frac{d}{3}}$$

$$R_{4d}(d) = \frac{1}{64\sqrt{5}}d^2e^{-\frac{d}{4}}\left(1 - \frac{1}{12}d\right)$$

$$R_{4f}(d) = \frac{1}{768\sqrt{35}}d^3e^{-\frac{d}{4}}$$

tada izraz u srednjoj zagradi daje veličinu efektivne potencijalne energije U_{ef} elektrona koji ima orbitni ugaoni moment $\vec{l}$:

$$U_{ef} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}.$$

Kada je $l = 0$, potencijalna energija je čisto Kulonovog tipa, Slika 9.1.3. Za $l \neq 0$, oblik krive potencijalne energije u blizini jezgra je drukčiji od Kulonove – sila je odbojna zbog doprinosa člana u kojem se javlja orbitni moment, Slika 9.1.3.

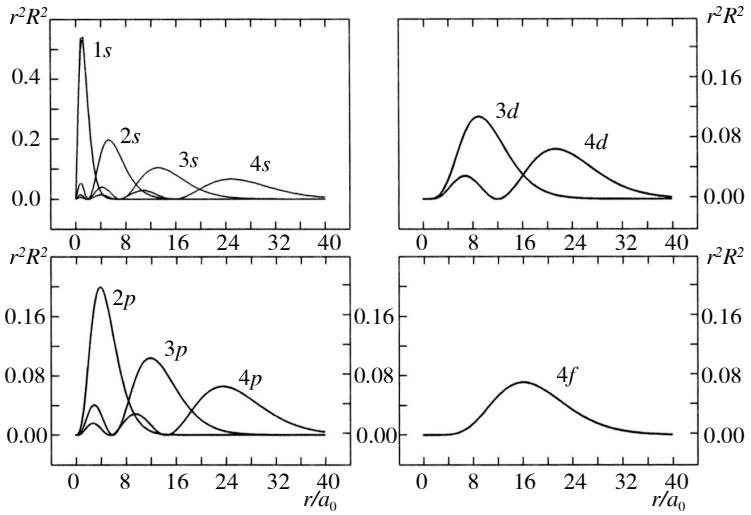
Radijalna distribuciona funkcija

Do sada je, na osnovu zavisnosti kvadrata talasne funkcije od rastojanja r, mogla da se odredi verovatnoća nalaženja elektrona na nekom rastojanju r od jezgra, ali u određenom pravcu θ i φ. Sada nas, međutim, interesuje verovatnoća nalaženja elektrona na nekom rastojanju r od jezgra, bez obzira na pravac, odnosno verovatnoća sa kojom se elektron može naći u bilo kojoj tački sferne ljuske debljine dr, na rastojanju r od jezgra. Zapremina sferne ljuske je:

$$r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta = r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \, (-\cos\theta)\Big|_0^{\pi} = 4\pi r^2 \, dr$$

dok je verovatnoća nalaženja elektrona u sfernoj ljusci debljine dr, na rastojanju r od jezgra, proizvod funkcije gustine verovatnoće i zapremine ljuske:

$$R^2 \times 4\pi r^2 dr = D(r)dr \qquad D(r) = 4\pi r^2 R^2.$$



Slika 9.1.4 Radijalna distribuciona funkcija [$D(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$], kao funkcija rastojanja r, za različite orbitale.

Funkcija *D(r)* naziva se radijalna distribuciona funkcija. Na Slici 9.1.4 prikazane su radijalne distribucione funkcije za *1s, 2s, 3s, 2p, 3p*, itd. orbitale. Sa dijagrama, između ostalog, sledi da je verovatnoća nalaženja elektrona u osnovnom stanju vodonika najveća pri vrednosti r=0,529 Å – što odgovara poluprečniku prve Borove orbitale. Međutim, za razliku od Borovog modela, prema kojem se očekuje da se elektron kreće po **orbitama** određenog poluprečnika (za određeno energijsko stanje elektrona), talasna mehanika predviđa da elektron može da se nađe, sa izvesnom verovatnoćom, na bilo kom rastojanju r od jezgra. Za razliku od *s* orbitala i njihovih kvadrata, koje pokazuju da je najveća gustina verovatnoće nalaženja elektrona u jezgru, radijalna distribuciona funkcija ima vrednost nula za $r = 0$.

Prostorna zavisnost orbitala

Do sada smo proučavali zavisnost talasne funkcije od poluprečnika r. Bitno je, takođe, proučiti i usmerenost orbitala u prostoru, dakle zavisnost talasne funkcije, odnosno kvadrata talasne funkcije, od uglova θ i φ. Prostorni izgled orbitala određen je proizvodom funkcija $\Theta_{l,m}(\theta)$ i $\Phi_m(\varphi)$, koji se zove sferni harmonik $Y_{lm}(\theta,\varphi)$:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi) . \tag{9.1.79}$$

Sferni harmonici su funkcije uglova θ i φ kod svih orbitala sa orbitnim kvantnim brojem l različitim od nule. Kod *s* orbitala kod kojih je $l = 0$, sferni harmonici svode se na konstante normiranja funkcija $\Theta_{l,m}(\theta)$ i $\Phi_m(\varphi)$, pa su zato *s* orbitale sferno simetrične. Pri određenom kvantnom broju l postoji $(2l+1)$ orbitala sa različitim kvantnim brojem m kojim se kvantuje vrednost projekcije orbitnog ugaonog momenta na pravac z-ose. Problem je, međutim, u tome što je funkcija $\Phi_m(\varphi)$ za $m \neq 0$ kompleksna pa je proizvod $\Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$ neprikladan za vizuelno predstavljanje orbitala. Zato se pri vizuelnom predstavljanju sfernih harmonika, umesto funkcija $\Phi_m(\varphi)$ za $m \neq 0$, koriste linearne kombinacije funkcija $\Phi_m(\varphi)$ i $\Phi_{-m}(\varphi)$:

$$\Phi_m(\varphi) + \Phi_{-m}(\varphi) = N_\varphi \cos m\varphi \tag{9.1.80}$$

$$\Phi_m(\varphi) - \Phi_{-m}(\varphi) = N_\varphi \sin m\varphi \tag{9.1.81}$$

a ovo smemo da uradimo jer su nove talasne funkcije (koje predstavljaju linearne kombinacije početnih) takođe, rešenja Šredingerove jednačine za vodonikov atom, čija energija u odsustvu spoljašnjeg (magnetnog) polja zavisi samo od glavnog kvantnog broja n. Ovakve linearne kombinacije originalnih funkcija nisu, međutim, svojstvene funkcije operatora projekcije orbitnog ugaonog momenta l_z jer ne odgovaraju jednoj vrednosti m. Kada se atom vodonika nalazi u magnetnom polju, kombinovanje talasnih funkcija s istom apsolutnom vrednošću za m, a s različitim znakom, nema smisla jer energija vodonikovog atoma u magnetnom polju zavisi od usmerenja vektora $\vec{l}$ u magnetnom polju. Faktor normiranja N_φ iznosi u slučajevima kada je $m \neq 0$, $1/\sqrt{\pi}$, što lako može da se izračuna pomoću jednačine (9.1.80), a kada je $m = 0$, $1/\sqrt{(2\pi)}$, što znamo odranije (poglavlje 9.1.4). Dakle, sferni harmonici imaju oblik:

$$Y_{l,\,m,\cos(|m|\varphi)}(\theta,\varphi) = N\Theta_{l,\,m}(\theta)\cos m\varphi \tag{9.1.82}$$

$$Y_{l,\,m,\sin(|m|\varphi)}(\theta,\varphi) = N\Theta_{l,\,m}(\theta)\sin m\varphi\,. \tag{9.1.83}$$

U drugom sfernom harmoniku izostavljena je imaginarna jedinica i jer se ona javlja kao multiplikativni faktor, pa kao takva može da se izostavi, jer i onako fizički smisao ima samo proizvod $\psi\psi^*$ ili (YY^*) u kome se imaginarna jedinica gubi. U slučaju kada je $m = 0$, pri nekom l:

$$Y_{l,0}(\theta,\varphi) = N\Theta_{l,0}(\theta)\,. \tag{9.1.84}$$

Odredićemo sada tri sferna harmonika $2p$ orbitale ($l = 1$, $m = \pm 1$ i 0). Pomoću formule (9.1.48) nalazimo prvo funkciju $\Theta_{1,1}$, $l = 1$, $|m| = 1$:

$$\Theta_{1,1}(\theta) = c'(1-x^2)^{\frac{1}{2}}\cdot\frac{d^2}{dx^2}(x^2-1)^1 \equiv \sin\theta; \qquad x \equiv \cos\theta$$

pa je: $\Theta_{1,1}(\theta) = \text{const.}\cdot\sin\theta$. Lako se dobija da je $\Theta_{1,0}(\theta) = \text{const.}\cdot\cos\theta$ (za $l = 1$ i $m = 0$). Pozitivna linearna kombinacija funkcija $\Phi_1(\varphi)$ i $\Phi_{-1}(\varphi)$ je $\cos\varphi$, a negativna $\sin\varphi$, pa uzimajući u obzir vrednosti konstanti normiranja dobijaju se, konačno, izrazi za ova tri sferna harmonika:

$$Y_{1,\,1,\,\cos\varphi}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\,\cos\varphi \tag{9.1.85}$$

$$Y_{1,\,1,\,\sin\varphi}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\,\sin\varphi \tag{9.1.86}$$

$$Y_{1,0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta\,. \tag{9.1.87}$$

Znajući kako ugaoni tako i radijalni deo talasne funkcije za $l = 1$ i $n = 2$, jednačina (9.1.77), možemo napisati ukupnu talasnu funkciju, ψ_{2p} ili $2p$ (broj 2 ispred p označava vrednost glavnog kvantnog broja) orbitalu:

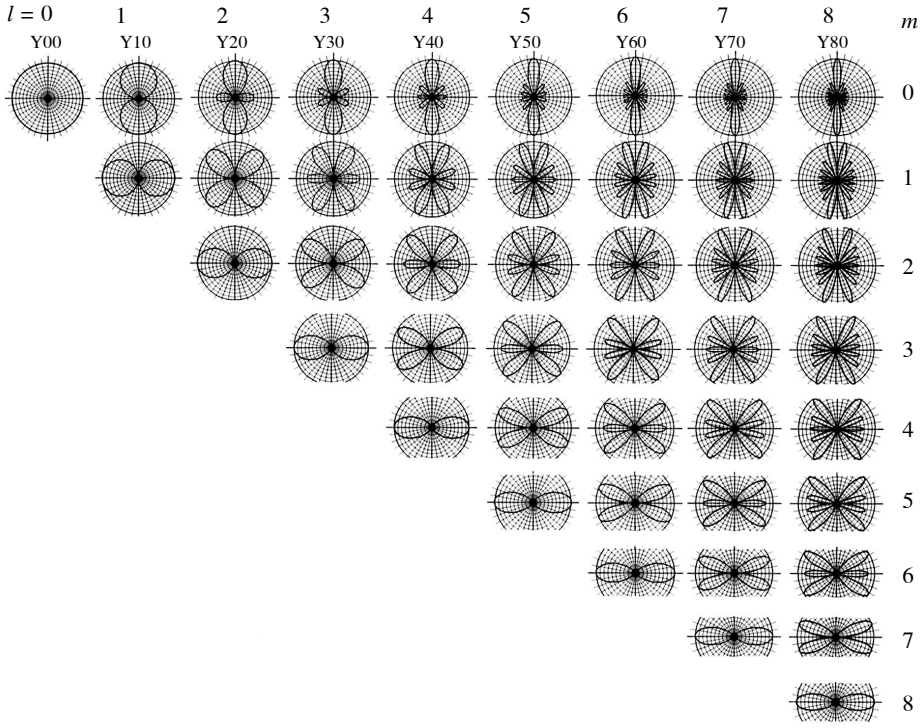
$$\psi_{2,\,1,\,\cos\varphi} = \frac{1}{4}(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho e^{-\frac{\rho}{2}}\sin\theta\,\cos\varphi = \psi_{2p_x} \tag{9.1.88}$$

$$\psi_{2,\,1,\,\sin\varphi} = \frac{1}{4}(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho e^{-\frac{\rho}{2}}\sin\theta\,\sin\varphi = \psi_{2p_y} \tag{9.1.89}$$

$$\psi_{2,\,1,\,0} = \frac{1}{4}(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho e^{-\frac{\rho}{2}}\cos\theta = \psi_{2p_z} \tag{9.1.90}$$

$2p_x$, $2p_y$ i $2p_z$ orbitale definisane su jednakostima (9.1.88), (9.1.89) i (9.1.90). Indeksi x, y i z uz $2p$ potiču od toga što su ove funkcije proporcionalne x, y i z koordinatama,

izraženim u sfernom koordinatnom sistemu [videti (9.1.22)]. Time je i označena usmerenost orbitale duž određene ose. I zaista, prema (9.1.88) najveća vrednost $2p_x$ orbitale je za $\cos\varphi = 1$ i pri $\varphi = 0$ i π (pri prikazivanju orbitala uzimaju se apsolutne vrednosti funkcija $\sin\varphi$, $\cos\varphi$, $\sin\theta$, itd.), a to je u xy ravni (tada je $\theta = \pi/2$) pravac x-ose. Takođe, najveća vrednost $2p_y$ orbitale je za $\varphi = \pi/2$ i $\varphi = 3\pi/2$, a to je pravac y-ose kada je $\theta = \pi/2$. Najveća vrednost $2p_z$ orbitale je za $\cos\theta = 1$. Dakle, za $\theta = 0$ i π, što je pravac z-ose. $2p_x$ talasna funkcija jednaka je nuli za $x = 0$ ili u yz-ravni, $2p_y$ je nula za $y = 0$ ili u xz-ravni dok je $2p_z$ nula za $z = 0$ ili u xy-ravni.



Slika 9.1.5 Polarni dijagram funkcije $\psi_{n,l} = R\,|Y_{l,m}(\theta,\varphi)|$, kod R=1 i φ=const. Konture se dobijaju povlačenjem radijus vektora pod određenim uglovima θ. Dužine radijus vektora srazmerne su apsolutnoj vrednosti funkcije $\Theta(\theta)$. Pravac vertikalne ose je pravac z-ose, a θ je ugao u odnosu na z-osu.

Na Slici 9.1.5 prikazani su polarni dijagrami funkcije ψ_{nl} gde je $\psi_{nl} = R_{nl}(r) \cdot |Y_{l,m}(\theta,\varphi)|$. Polarni dijagrami su predstavljeni u ravnima φ = const., takvim da je $\Phi(\varphi) = 1$, za određeno rastojanje r, pri čemu je tada radijalni deo jednak nekoj konstanti. To, praktično, znači da su na slici prikazani polarni dijagrami funkcije $\Theta_{l,m}(\theta)$. Ovaj polarni dijagram dobija se povlačenjem radijus vektora, pod određenim uglom θ, pri čemu uglu $\theta = 0$ odgovara položaj z-ose, a vrednost ugla θ menja se od 0 do 2π (iako je u sfernom koordinatnom sistemu ugao θ definisan između 0 i π, uobičajeno je da se funkcija $\Theta_{l,m}(\theta)$ prikazuje u celom području 2π). Dužine radijus vektora srazmerne su apsolutnoj vrednosti funkcije $Y(\theta, \varphi)$, odnosno $\Theta(\theta)$. Ovakvi dijag-

rami mogu da se crtaju za različito r, s tim što se najvećom verovatnoćom nalaženja elektrona odlikuju orbitale sa onim r, pri kojem je radijalna talasna funkcija najveća. Sa ove slike očigledna je usmerenost $\Theta_{1,0}(\theta)$ (p_z) duž z-ose, odnosno $\Theta_{1,1}(\theta)$ duž x-ose (p_x) ili duž y-ose (p_y).

Ugaoni delovi (po φ) $2p_x$ i $2p_y$ orbitala odgovaraju pozitivnoj i negativnoj linearnoj kombinaciji funkcija $\Phi_{+1}(\varphi)$ i $\Phi_{-1}(\varphi)$, pri čemu su u indeksu funkcija $\Phi(\varphi)$ naznačene vrednosti magnetnog kvantnog broja ($m = 1$ ili $m = -1$). One ne mogu da se upotrebe za analizu ponašanja atoma vodonika u magnetnom polju. Kod treće $2p$ orbitale, $2p_z$, određene funkcijom $\Theta(\theta)$ i $\Phi(\varphi)$ pri vrednosti magnetnog kvantnog broja $m = 0$, projekcija orbitnog ugaonog momenta na z-osu je nula, dok je funkcija gustine verovatnoće nalaženja elektrona $\sim f(r)\cdot\cos^2\theta$, videti jednačine (9.1.87) i (9.1.90), i prema tome najveća duž z-ose ($\theta = 0$ i $\theta = \pi$).

Postoji izvesna korespondencija između položaja Borovih orbita i $2p_x$, $2p_y$ i $2p_z$ orbitala. Pri kretanju elektrona po kružnoj orbiti u xy-ravni, ugaoni moment ima pravac z-ose. Kod $2p_x$ i $2p_y$ orbitale najveća je verovatnoća nalaženja elektrona baš u ravnima koje su normalne na z--osu (u kojoj se nalazi Borova orbita), mada postoje i druge ravni u kojima je ova verovatnoća različita od nule. Slično može da se kaže i za $2p_z$ orbitalu i Borovu orbitu postavljenu u xz-ravni kada je projekcija momenta impulsa na z-osu jednaka nuli. Gustina verovatnoće nalaženja elektrona kod $2p_z$ orbitale najveća je u pravcu z-ose, dakle u ravni Borove orbite. Na Slici 9.1.6 prikazani su polarni dijagrami funkcija $\Theta_{l,m}(\theta)$ za $m = \pm l$.

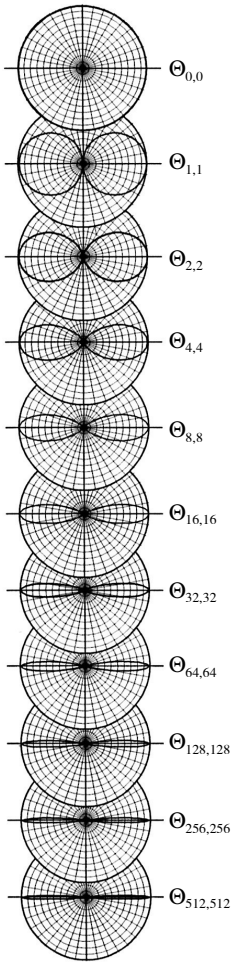
Kod d orbitale, kod koje je vrednost orbitnog kvantnog broja $l = 2$, pomoću jednačine (9.1.71) izračunavaju se odgovarajuće funkcije $\Theta_{2,m}(\theta)$. Zatim se, pomoću jednačina (9.1.82) i (9.1.83), određuju i odgovarajući sferni harmonici:

$$Y_{2,2,\cos 2\varphi}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin^2\theta\,\cos 2\varphi \qquad (Y_{x^2-y^2}) \quad (9.1.91)$$

$$Y_{2,2,\sin 2\varphi}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin^2\theta\,\sin 2\varphi \qquad (Y_{xy}) \quad (9.1.92)$$

$$Y_{2,1,\cos\varphi}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin\theta\,\cos\theta\,\cos\varphi \quad (Y_{xz}) \quad (9.1.93)$$

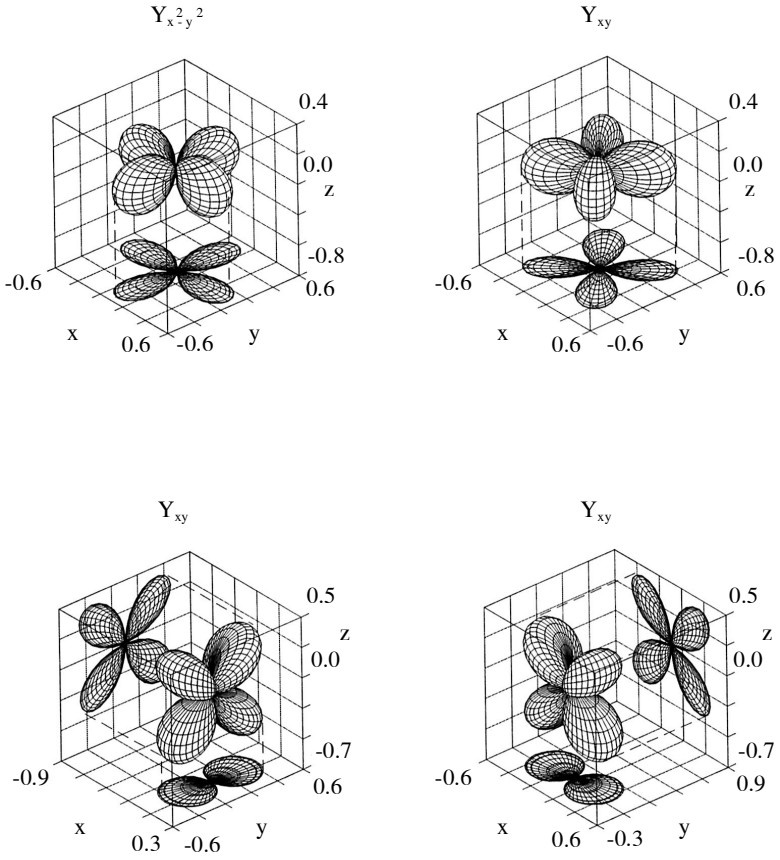
$$Y_{2,1,\sin\varphi}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin\theta\,\cos\theta\,\sin\varphi \qquad (Y_{yz}) \quad (9.1.94)$$



Slika 9.1.6 Polarni dijagrami funkcija $\Theta_{l,m}(\theta)$ za $m = \pm l$.

$$Y_{2,0} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta - 1) \qquad (Y_{z^2}) . \tag{9.1.95}$$

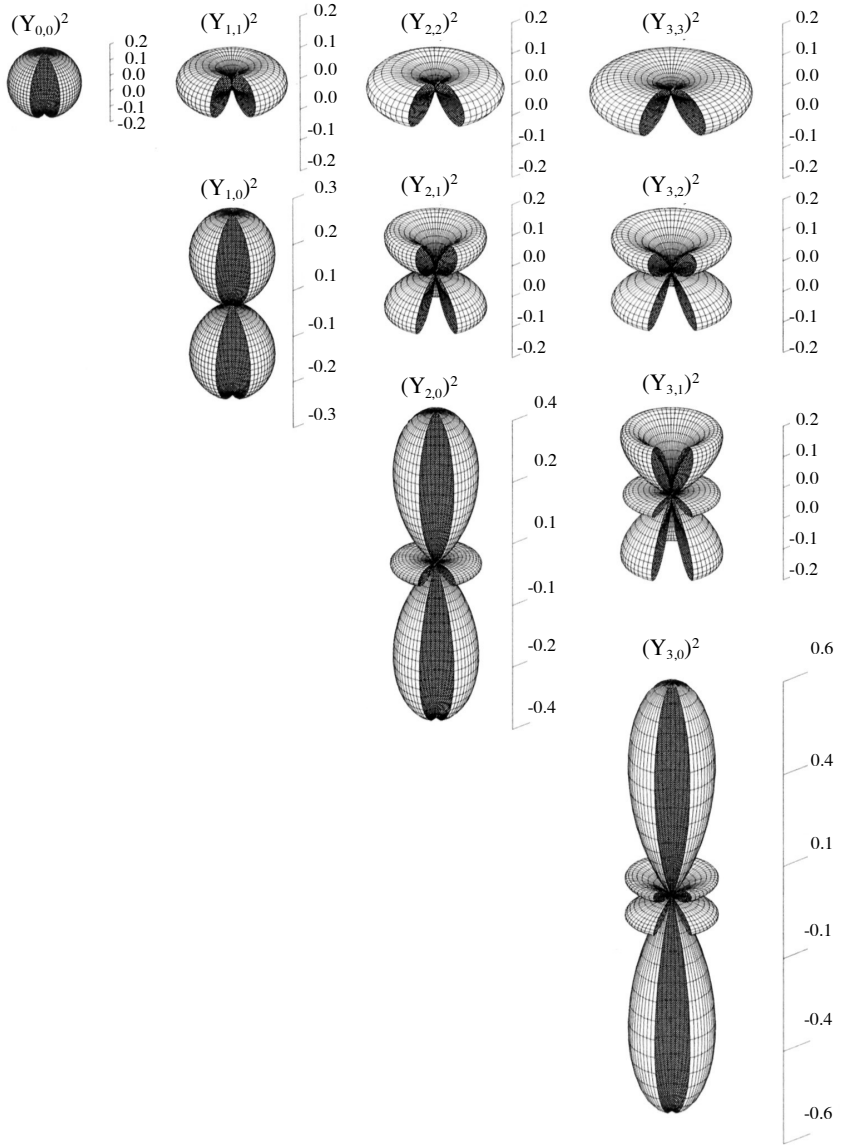
Indeks uz sferni harmonik Y označava da je analitički oblik date funkcije srazmeran odgovarajućoj kombinaciji koordinata. Prostorni izgled d orbitala, zajedno sa njihovim polarnim dijagramima, prikazan je na Slici 9.1.7.



Slika 9.1.7 Prostorni prikaz i polarni dijagram d orbitala.

Na Slici 9.1.8 prikazani su kvadrati modula nekoliko ugaonih funkcija $|Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2$:

$$|Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2 = \Theta^2_{l,m}(\theta)\cdot\Phi_m(\varphi)\Phi^*_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Theta^2_{l,m}(\theta) .$$



Slika 9.1.8 Prostorni prikaz ugaone funkcije prvih nekoliko orbitala.

Ovoga puta funkcije $\Phi_m(\varphi)$ su originalne funkcije koje odgovaraju određenom kvantnom broju m. Množenjem takve funkcije sa njoj konjugovano kompleksnom funkcijom, sferni harmonici pretvaraju se u realne funkcije koje mogu da se nacrtaju, ali se s druge strane gubi zavisnost od φ. Takve orbitale su osno simetrične (u odnosu na z-osu) i predstavljaju, prema Bornovom tumačenju, funkciju gustine verovatnoće.

9.1.8 Orbitni ugaoni moment

Komponente orbitnog ugaonog momenta duž koordinatnih osa

Vrednosti dinamičkih promenljivih, kao što su energija, impulsi, momenti impulsa (ugaoni momenti) i njihove projekcije na koordinatne ose, predstavljaju se u kvantnoj mehanici svojstvenim vrednostima odgovarajućih operatora. Određuju se rešavanjem diferencijalne jednačine tipa Šredingerove jednačine kojom se definiše ovaj svojstveni problem. Tako se svojstvene vrednosti operatora $\hat{l}_z$ (ili $\hat{L}_z$, gde se velikim slovom L označavaju orbitni ugaoni moment, odnosno njegov operator jednog višeelektronskog atoma) određuju iz jednačine:

$$\hat{l}_z\psi = k\psi . \tag{9.1.96}$$

Operator $\hat{l}_z$ izračunava se, najpre, u sfernim koordinatama korišćenjem jednačine (8.4.28) kojom je definisan i jednačine (9.1.25) kojom su predstavljeni odgovarajući parcijalni diferencijali u sfernim koordinatama:

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right] = \frac{\hbar}{i}\left[r\sin\theta\cos\varphi\left(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] -$$

$$-\frac{\hbar}{i}\left[r\sin\theta\sin\varphi\left(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] = \tag{9.1.97}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left[r\sin^2\theta\cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \sin\theta\cos\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] -$$

$$-\frac{\hbar}{i}\left[r\sin^2\theta\cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \sin\theta\cos\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Zamenjivanjem izraza za $\hat{l}_z$, prema (9.1.97), dolazi se do diferencijalne jednačine:

$$\frac{d\psi}{d\varphi} - \frac{i}{\hbar}k\psi = 0 . \tag{9.1.98}$$

Rešenje ove diferencijalne jednačine traži se u obliku funkcije $\psi = e^{r\varphi}$. Pošto se diferencijal funkcije ψ (po φ) i sama funkcija zamene u (9.1.98), dobija se:

$$r - \frac{ik}{\hbar} = 0 \Rightarrow r = \frac{ik}{\hbar}$$

dok je sama funkcija ψ:

$$\psi = e^{\frac{ik}{\hbar}\varphi} .$$

Kako funkcija mora da ima iste vrednosti za uglove φ i φ+2π (videti deo 9.1.4), sledi:

$$\frac{k}{\hbar} = m_l \Rightarrow m_l = 0;\pm1;\pm2;\pm3\ldots \tag{9.1.99}$$

Iz jednačine (9.1.99) može da se zaključi da su svojstvene vrednosti operatora $\hat{l}_z$ jednake proizvodu broja m_l i veličine $\hbar$ [$h/(2\pi)$]. To, takođe, znači da su moguće vrednosti dinamičke promenljive l_z (ili, drugim rečima, projekcije vektora orbitnog momenta na izabrani pravac, a obično se uzima pravac z-ose) kvantovane i izražavaju se kao proizvod (magnetnog) kvantnog broja m_l i veličine $\hbar$. Indeks l kod broja m pokazuje da je reč o orbitnom ugaonom momentu.

Veličina orbitnog ugaonog momenta

Da bi se odredile moguće vrednosti orbitnog ugaonog momenta, treba da se reši problem i odrede svojstvene vrednosti operatora kvadrata ugaonog momenta $\hat{l}^2$:

$$\hat{l}^2\psi = \lambda\psi. \tag{9.1.100}$$

Prethodno treba izračunati ovaj operator. Operator kvadrata ugaonog momenta jednak je:

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2. \tag{9.1.101}$$

Zatim se određuju operatori $\hat{l}_x^2$ i $\hat{l}_y^2$ [operator $\hat{l}_z^2$ već je određen, jednačina (9.1.97)]. Korišćenjem jednačine (8.4.28) kojom su definisani ovi operatori i (9.1.25) koja sadrži potrebne izvode u sfernim koordinatama, dobija se:

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i}\left[y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right] =$$

$$\frac{\hbar}{i}\left[r\sin\theta\sin\varphi\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} - \frac{\partial}{\partial\theta}\right) -\right.$$

$$\left. -r\cos\theta\left(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left[r\sin\theta\sin\varphi\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \sin^2\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} -\right.$$

$$\left. -r\sin\theta\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} - \cos^2\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right].$$

$$l_x = \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{9.1.102}$$

Istim postupkom može da se izračuna $\hat{l}_y$:

$$\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{9.1.103}$$

Kako je $\hat{l}_z$ poznato odranije, sada može da se odredi $\hat{l}^2$ koristeći (9.1.101):

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = (\hat{l}_x)[\hat{l}_x\psi] + (\hat{l}_y)[\hat{l}_y\psi] + (\hat{l}_z)[\hat{l}_z\psi];$$

$$\hat{l}^2\psi = \frac{\hbar^2}{i^2}\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\left(-\sin\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right) +$$

$$+ \frac{\hbar^2}{i^2}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\left(\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right) +$$

$$+ \frac{\hbar^2}{i^2}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right).$$

Posle sređivanja jednačine dobija se:

$$\hat{l}^2\psi = -\hbar^2\left[\sin^2\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} - \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{\sin^2\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos^2\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\theta} -\right.$$

$$\left. -\left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\cos^2\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right] -$$

$$-\hbar^2\left[\cos^2\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{\sin^2\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin^2\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\theta} +\right.$$

$$\left. + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\sin^2\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right].$$

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right). \tag{9.1.104}$$

Ako se ovaj operator primeni na talasnu funkciju ψ predstavljenu u obliku proizvoda tri funkcije $R(r)$, $\Theta(\theta)$ i $\Phi(\varphi)$ [videti jednačine (9.1.30), (9.1.34) i (9.1.69)] i zatim dobijeni izraz predstavi u skladu sa svojstvenim problemom (9.1.100), sledi:

$$\hat{l}^2\psi = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)R(r)\Theta(\theta)e^{im\varphi}$$

$$= -\hbar^2\left(Re^{im\varphi}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + Re^{im\varphi}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{d\Theta}{d\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}(-m^2)R\Theta e^{im\varphi}\right) = \lambda R\theta e^{im\varphi}. \tag{9.1.105}$$

Obe strane jednačine (9.1.105) podele se sa $-\hbar^2 R e^{im\varphi}$ i preostali deo s desne strane $(\lambda/\hbar^2)$ prebaci se na levu stranu jednačine, koja će se sada izjednačiti sa nulom:

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{d\Theta}{d\theta} + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0. \tag{9.1.106}$$

Jednačina (9.1.106) ista je kao ugaona Šredingerova jednačina za vodonikov atom (po θ) (9.1.37) za:

$$f = \frac{\lambda}{\hbar^2}. \tag{9.1.107}$$

Kako je prema jednačini (9.1.46):

$$f = l(l+1)$$

gde je l orbitni kvantni broj, iz (9.1.107) sledi da su svojstvene vrednosti operatora $\hat{l}^2$, λ ili, drugim rečima, moguće vrednosti kvadrata orbitnog ugaonog momenta:

$$\lambda = l(l+1)\hbar^2 \Rightarrow 0;\ 2\hbar^2;\ 6\hbar^2;\ 12\hbar^2;\ 20\hbar^2 \ \Rightarrow \tag{9.1.108}$$
$$|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\ \hbar .$$

Treba podsetiti na to da je, u okviru vektorskog modela atoma jednačina (9.1.108) uvedena i korišćena. Ovde smo pokazali samo kako ona može i da se izvede.

Primeri

Primer 9.1.1 Izračunati najverovatnije rastojanje od jezgra elektrona vodonikovog atoma i He^+ jona u 1*s* orbitali.

REŠENJE:

Najverovatnije rastojanje definiše se kao rastojanje r za koje funkcija gustine verovatnoće ima najveću vrednost. Određuje se diferenciranjem radijalne distribucione funkcije $D(r)$ (bitno je samo rastojanje bez obzira na pravac u prostoru) po poluprečniku r i izjednačavanjem ovog izraza sa nulom. Prema (9.1.74):

$$D(r) = 4\pi r^2\psi^2 = 4\pi r^2 \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2Zr}{a_0}};\ \frac{dD(r)}{dr} = \frac{4Z^3}{a_0^3}\left(2r - \frac{2Z}{a_0}r^2\right) = 0 \Rightarrow r = \frac{a_0}{Z}.$$

Kod vodonikovog atoma, 1*s* elektron najverovatnije će se naći na rastojanju a_0, a to je rastojanje koje odgovara prvom Borovom poluprečniku (0.529 $\mathring{A}$). Kod helijumovog jona ovo rastojanje je dva puta manje, jer je naelektrisanje helijumovog jona dva puta veće od naelektrisanja vodonikovog atoma.

Primer 9.1.2 Odrediti rastojanja r pri kojima radijalna funkcija gustine verovatnoće R_{3s} vodonikovog atoma ima vrednost nula.

REŠENJE:

Iz Tabele 9.1.1 nalazi se funkcija R_{3s} i određuju se nule ove funkcije:

$$R_{3s} = a_0^{-3}\left(\frac{2}{9\sqrt{3}}\right)^2 e^{-\frac{2r}{3a_0}}\left[3 - 2\frac{r}{a_0} + \frac{2}{9}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right]^2 = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{2}{9}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 - 2\frac{r}{a_0} + 3 = 0 \Rightarrow r_1 = 7{,}1a_0 = 0{,}37nm; \quad r_2 = 1{,}9a_0 = 0{,}10nm.$$

Ove tačke nazivaju se čvorne tačke, a to su one tačke u kojima funkcija prolazi kroz nulu (ima nultu vrednost).

Primer 9.1.3 Izračunati srednju vrednost radijusa R_{1s} orbitale vodonikovog atoma.

REŠENJE:

Kako prema Bornovom tumačenju talasne funkcije kvadrat talasne funkcije (ili kvadrat modula kada je ona kompleksna) predstavlja gustinu verovatnoće, srednja vrednost poluprečnika r izračunava se na osnovu definicije srednje vrednosti iz teorije verovatnoće (videti dodatak uz poglavlje 8.4).

$$\langle r\rangle = \int_0^\infty rR^2(r)r^2dr = \frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r_0}{a_0}}dr.$$

Posle trostrukog parcijalnog integraljenja dobija se:

$$\frac{4}{a_0^3}\left\{-\frac{a_0}{2}r^3e^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty + \frac{3a_0}{2}\left[-\frac{a_0}{2}r^2e^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty + a_0\left(-\frac{a_0}{2}re^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty + \frac{a_0}{2}\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}}dr\right)\right]\right\} =$$

$$= \frac{4}{a_0^3}\left\{-\frac{a_0}{2}r^3e^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty - \frac{3a_0^2}{2}r^2e^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty - \frac{3a_0^3}{4}re^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty + \frac{3}{2}\frac{a_0^4}{4}e^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty\right\} = \frac{3}{2}a_0.$$

9.2 ATOMI SA VIŠE ELEKTRONA

9.2.1 Šredingerova jednačina atoma sa *N* elektrona

Šredingerova jednačina za atom sa N elektrona u laboratorijskom koordinatnom sistemu ima oblik:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2}\right) -\right.$$

$$\left. -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{(x_k - X)^2 + (y_k - Y)^2 + (z_k - Z)^2}} +\right.$$

$$+\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l\neq k}^{N}\frac{1}{\sqrt{(x_k-x_l)^2+(y_k-y_l)+(z_k-z_l)^2}}\Bigg] \tag{9.2.1}$$

$$\cdot\,\Psi(X,Y,Z,x_1,y_1,z_1,\ldots,x_N,y_N,z_N) = E\Psi(X,Y,Z,x_1,y_1,z_1,\ldots,x_N,y_N,z_N).$$

Prvi sabirak na levoj strani jednačine predstavlja kinetičku energiju jezgra mase M, a drugi član (jednostruka suma po elektronima) označava kinetičku energiju elektrona mase m. Treći sabirak predstavlja elektrostatičko (Kulonovo) privlačenje elektrona i jezgra sa naelektrisanjem Ze, a poslednji sabirak prikazuje međusobnu interakciju elektrona. Treba uočiti da indeksi k i l, u dvostrukoj sumi koja opisuje Kulonovo odbijanje elektrona, moraju da se razlikuju jedan od drugog (elektron ne interaguje sa samim sobom) i da je uveden činilac 1/2 da bi se dobio pravilan broj parnih interakcija (u dvostrukoj sumi svaka interakcija javlja se dva puta – za elektrone 1 i 2, npr. jednom kao $k = 1$ i $l = 2$, drugi put kao $k = 2$, $l = 1$).

Broj promenljivih u Šredingerovoj jednačini (9.2.1) je 3 ($N + 1$). Kao i kod vodonikovog atoma, prelaskom na sistem centra mase, problem može da se svede na translatorno kretanje atoma u celini i na kretanje N elektrona pri nepokretnom jezgru.

Uvešćemo sada koordinate centra mase: x_0, y_0 i z_0:

$$\begin{aligned}(M+Nm)x_0 &= MX + m\sum_{i=1}^{N}x_i\\ (M+Nm)y_0 &= MY + m\sum_{i=1}^{N}y_i\\ (M+Nm)z_0 &= MZ + m\sum_{i=1}^{N}z_1\end{aligned} \tag{9.2.2}$$

i relativne koordinate elektrona u odnosu na jezgro:

$$x_{kr} = x_k - X;\quad y_{kr} = y_k - Y;\quad z_{kr} = z_k - Z \tag{9.2.3}$$

$k = 1, 2,....$ sa namerom da koordinate ($X, Y, Z, x_1, y_1, z_1,..,x_N,y_N,z_N$) u jednačini (9.2.1) pretvorimo u koordinate ($x_0, y_0, z_0, x_{1r}, y_{1r}, z_{1r},...,x_{Nr},y_{Nr},z_{Nr}$). Kako se u jednačinama (9.2.1) – (9.2.3), x, y i z koordinate javljaju uvek odvojeno jedna od druge, postupak može da se pojednostavi razmatranjem samo jednog skupa koordinata (npr. x). Transformisaćemo prvo izraz za kinetičku energiju atoma (sadrži parcijalne izvode) pomoću poznatih jednačina kojima se parcijalni izvodi po koordinatama Q_1, $Q_2,...,Q_n$ prevode u parcijalne izvode po drugom skupu koordinata q_1, $q_2,...,q_n$:

$$\frac{\partial}{\partial Q_k} = \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial q_i}{\partial Q_k}\frac{\partial}{\partial q_i}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial Q_l \partial Q_k} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial q_i}{\partial Q_k}\frac{\partial q_j}{\partial Q_l}\frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} + \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial^2 q_i}{\partial Q_k \partial Q_l}\frac{\partial}{\partial q_l}\,.$$

U posebnom slučaju:

$$\frac{\partial^2}{\partial Q_k^2} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial q_i}{\partial Q_k}\frac{\partial q_j}{\partial Q_k}\frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} + \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial^2 q_i}{\partial Q^2{}_k}\frac{\partial}{\partial q_i}.$$

Korišćenjem prethodnih jednačina dobija se:

$$\frac{\partial^2}{\partial X^2} = \left(\frac{M}{M+Nm}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x_0{}^2} - 2\frac{M}{M+Nm}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_0 \partial x_{ir}} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_{ir}\partial x_{jr}} \tag{9.2.4}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} = \left(\frac{m}{M+Nm}\right)\frac{\partial^2}{\partial x_0{}^2} + 2\frac{m}{M+Nm}\frac{\partial^2}{\partial x_0 \partial x_{kr}} + \frac{\partial^2}{\partial x_{kr}^2}\,. \tag{9.2.5}$$

Koristeći (9.2.4) i (9.2.5) dobija se:

$$-\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{1}{2m}\sum_{k=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} =$$

$$= -\frac{1}{2(M+Nm)}\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} - \frac{m+M}{2mM}\sum_{k=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_{kr}^2} - \frac{1}{M}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l\neq k}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_{kr}\partial x_{lr}}. \tag{9.2.6}$$

Na isti način dobijaju se odgovarajući izrazi i za y i z koordinate. Zamenjujući stare koordinate novim i u izrazu za potencijalnu energiju, dobija se izraz za Šredingerovu jednačinu (9.2.1) u koordinatama centra mase i u relativnim koordinatama:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(M+Nm)}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_0^2}\right) - \hbar^2\frac{m+M}{2mM}\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_{kr}^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_{kr}^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_{kr}^2}\right) -\right.$$

$$-\frac{\hbar^2}{M}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l\neq k}^{N}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_{kr}\partial x_{lr}} + \frac{\partial^2}{\partial y_{kr}\partial y_{lr}} + \frac{\partial^2}{\partial z_{kr}\partial z_{lr}}\right) - \tag{9.2.7}$$

$$\left.-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{x_{kr}^2 + y_{kr}^2 + z_{kr}^2}} + \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l\neq k}^{N}\frac{1}{\sqrt{(x_{kr}-x_{lr})^2 + (y_{kr}-y_{lr})^2 + (z_{kr}-z_{lr})^2}}\right]\cdot$$

$$\cdot\,\Psi(x_0,y_0,z_0,x_{1r},y_{1r},z_{1r},\ldots,x_{Nr},y_{Nr},z_{Nr}) = E\Psi(x_0,y_0,z_0,x_{1r},y_{1r},z_{1r},\ldots,x_{Nr},y_{Nr},z_{Nr})\,.$$

U prvom sabirku (i samo u njemu) na levoj strani jednačine (9.2.7) javljaju se izvodi koordinata centra mase x_0, y_0, z_0 a $M + Nm$ je masa celog atoma. Ovaj član predsta-

vlja, dakle, translaciju atoma u celini i on, kao i kod vodonikovog atoma, predstavljanjem talasne funkcije Ψ u obliku proizvoda dve funkcije Ψ_1 i Ψ_2:

$$\Psi(x_0,y_0,z_0,x_{1r},y_{1r},z_{1r},\ldots,x_{Nr},y_{Nr},z_{Nr}) = \Psi_1(x_0,y_0,z_0) \cdot \Psi_2(x_{1r},y_{1r},z_{1r},\ldots,x_{Nr},y_{Nr},z_{Nr}) \tag{9.2.8}$$

može da se odvoji od ostalog dela Šredingerove jednačine. Ostali članovi u jednačini (9.2.7) zavise samo od koordinata x_{1r}, y_{1r}, z_{1r},...x_{Nr},y_{Nr}, z_{Nr} i opisuju kretanje elektrona u sistemu centra mase. Treći sabirak [na levoj strani jednačine (9.2.7)] koji uključuje mešovite izvode po koordinatama para elektrona i naziva se polarizacioni član, ima koeficijent $\hbar^2/2M$. On je za nekoliko redova veličine manji od koeficijenta u drugom sabirku, $\hbar^2(m+M)/2mM \simeq \hbar^2/2m$, pa može da se zanemari. Redukovanu masu označićemo sa $\mu = mM/(m+M)$ i izostaviti ubuduće indeks r u oznakama koordinata, tj. pisaćemo x_k umesto x_{kr}, imajući na umu da je sada reč o relativnim koordinatama elektrona u odnosu na jezgro, dakle, različitim od onih u jednačini (9.2.1). Suma parcijalnih izvoda po Dekartovim koordinatama $\partial^2/\partial x_k^2 + \partial^2/\partial y_k^2 + \partial^2/\partial z_k^2$ označava se sa Δ_k rastojanje k-tog elektrona od jezgra, $\sqrt{(x^2{}_k + y^2{}_k + z^2{}_k)}$, sa r_k, rastojanje između k-tog i l-tog elektrona $\sqrt{[(x_k-x_l)^2+(y_k-y_l)^2+(z_k-z_l)^2]}$ sa r_{kl}. Tada Šredingerova jednačina, koja opisuje stanje atoma sa N elektrona, dobija oblik:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{k=1}^{N}\Delta_k - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{r_k} + \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l\neq k}^{N}\frac{1}{r_{kl}}\right)\Psi(\vec{r}_1\ldots,\vec{r}_N) = E\Psi(\vec{r}_1\ldots,\vec{r}_N) \tag{9.2.9}$$

odnosno:

$$H\Psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N) = E\Psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N)\,. \tag{9.2.9a}$$

Pri čemu je H, Hamiltonov operator:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{k=1}^{N}\Delta_k - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{r_k} + \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l\neq k}^{N}\frac{1}{r_{kl}}.$$

Treba napomenuti to da je u poslednjim dvema jednačinama funkcija Ψ_2 iz jednačine (9.2.8) obeležena sa Ψ.

Jednačina (9.2.9) je parcijalna diferencijalna jednačina sa $3N$ Dekartovih promenljivih. Uobičajeni pokušaj razdvajanja promenljivih predstavljanjem funkcije Ψ u obliku proizvoda više funkcija:

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N) = \Psi_1(\vec{r}_1)\cdot\Psi_2(\vec{r}_2),\ldots\cdot\Psi_N(\vec{r}_N) \tag{9.2.10}$$

ne vodi do uspeha, zbog sprege koordinata različitih elektrona preko članova $1/r_{kl} = 1/\sqrt{(x_k-x_l)^2+(y_k-y_l)^2+(z_k-z_l)^2}$. Šredingerova jednačina za sve ato-

me koji imaju više od jednog elektrona predstavljaju tzv. višečestični problem koji ne može da se reši u analitičkom obliku. Dakle, u svim ovim slučajevima, koriste se približne metode rešavanja. U sledećem poglavlju, na primeru atoma helijuma, najjednostavnijeg atoma posle vodonikovog, prikazaćemo neke osnovne ideje koje se koriste pri približnom rešavanju odgovarajuće Šredingerove jednačine. Zatim ćemo skicirati opšti način rešavanja stacionarne Šredingerove jednačine za višeelektronske sisteme, tzv. metoda samousaglašenog polja (Hartri–Fokov metod).

9.2.2 Atom helijuma

Helijumov atom ima dva elektrona, pa Šredingerova jednačina kojom se on opisuje glasi:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta_1+\Delta_2)-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r_{12}}\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,. \tag{9.2.11}$$

Uvođenjem oznaka:

$$h_1 \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_1}\;;\quad h_2 \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_2}\;;\quad h_{12} \equiv \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r_{12}} \tag{9.2.11a}$$

(9.2.11) dobija oblik:

$$(h_1+h_2+h_{12})\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \tag{9.2.12}$$

h_1 uključuje koordinate i izvode po koordinatama samo prvog elektrona, h_2 samo drugog elektrona.

U članu $h_{12}=e^2/r_{12}= 1/\sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2+(z_1-z_2)^2}$ spregnute su koordinate oba elektrona. Kao što je već rečeno, ovaj član onemogućuje razdvajanje promenljivih dva elektrona, odnosno rastavljanje šestodimenzione Šredingerove jednačine (9.2.11) na dve trodimenzione (po koordinatama x_1, y_1, z_1 odnosno x_2, y_2, z_2) jednačine.

Jedan od mogućih načina za približno rešavanje Šredingerove jednačine za He atom sastoji se u zanemarivanju člana $h_{12} \sim e^2/r_{12}$, što bi odgovaralo fizičkoj situaciji u kojoj elektroni ne osećaju prisustvo jedan drugog (model „nezavisnih elektrona"). Predstavljajući tada talasnu funkciju He atoma u obliku:

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2) \tag{9.2.13}$$

i uvrštavajući je u Šredingerovu jednačinu (9.2.12) u kojoj je izostavljen član h_{12} dobija se:

$$(h_1+h_2)\psi_1(\vec{r}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2) = E\psi_1(\vec{r}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2) \tag{9.2.14}$$

odnosno uvrštavajući izraze za h_1 i h_2 iz (9.2.11a):

$$\psi_2(\vec{r}_2)\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1\psi_1(\vec{r}_1)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_1}\psi_1(\vec{r}_1)\right]+$$

$$+\psi_1(\vec{r}_1)\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_2\psi_2(\vec{r}_2)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_2}\psi_2(\vec{r}_2)\right]=E\psi_1(\vec{r}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2)\,. \tag{9.2.15}$$

Deljenjem leve i desne strane jednačine (9.2.15) sa $\psi_1(\vec{r}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2)$ dobija se:

$$\frac{1}{\psi_1(\vec{r}_1)}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1\psi_1(\vec{r}_1)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_1}\psi_1(\vec{r}_1)\right]+$$

$$+\frac{1}{\psi_2(\vec{r}_2)}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_2\psi_2(\vec{r}_2)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_2}\psi_2(\vec{r}_2)\right]=E\,. \tag{9.2.16}$$

Leva strana jednačine (9.2.16) predstavlja zbir dva izraza, od kojih prvi izraz zavisi od promenljive $\vec{r}_1=\{x_1, y_1, z_1\}$, a drugi od $\vec{r}_2=\{x_2, y_2, z_2\}$. Kako su ove promenljive međusobno nezavisne, a zbir oba člana jednak je stalnoj veličini E, sledi da svaki od ova dva člana mora da bude neka konstanta. Ako te konstante označimo sa E_1 i E_2, uz uslov $E = E_1 + E_2$, iz jednačine (9.2.16) dobija se:

$$\frac{1}{\psi_1(\vec{r}_1)}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1\psi_1(\vec{r}_1)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_1}\psi_1(\vec{r}_1)\right]=E_1 \tag{9.2.17a}$$

$$\frac{1}{\psi_2(\vec{r}_2)}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_2\psi_2(\vec{r}_2)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_2}\psi_2(\vec{r}_2)\right]=E_2\,. \tag{9.2.17b}$$

Množenjem jednačine (9.2.17a) sa $\psi_1(\vec{r}_1)$, a jednačine (9.2.17b) sa $\psi_2(\vec{r}_2)$, dobija se:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1\psi_1(\vec{r}_1)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_1}\psi_1(\vec{r}_1)=E_1\psi_1(\vec{r}_1) \tag{9.2.18a}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_2\psi_2(\vec{r}_2)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_2}\psi_2(\vec{r}_2)=E_2\psi_2(\vec{r}_2)\,. \tag{9.2.18b}$$

Jednačine (9.2,18a) i (9.2.18b) identične su Šredingerovoj jednačini za vodonikov atom (9.1.16). Kako smo Šredingerovu jednačinu za vodonikov atom već rešili, možemo odmah dobiti i rešenje za helijumov atom u okviru aproksimacije nezavisnih elektrona. Osnovno stanje (stanje najniže energije) He atoma opisano je talasnom funkcijom (9.2.13). Kada se uzme da ψ_1 i ψ_2 odgovaraju 1s orbitalama vodonikovog atoma za $Z = 2$ (He^+ jona), dobija se za Ψ:

$$\Psi=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{Zr_1}{a_0}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{Zr_2}{a_0}}=\frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3}e^{-\frac{Z}{a_0}(r_1+r_2)} \tag{9.2.19}$$

a odgovarajuća energija je:

$$E = E_1 + E_2 = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z^2e^2}{2a_0} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z^2e^2}{2a_0} = -108,8\ eV. \qquad (9.2.20)$$

Dobijeni rezultat nije u saglasnosti sa eksperimentalnom vrednošću koja iznosi -78,6 eV. Ovakvo neslaganje moglo je i da se očekuje s obzirom na to da zanemarivanje međusobnog delovanja elektrona nije bilo motivisano fizičkim razlozima, već jedino težnjom da se pojednostavi rešavanje Šredingerove jednačine. Pokazaćemo, međutim, da neki rezultati ovog grubog proračuna ipak mogu da se iskoriste kao polazna osnova pri primeni finijih postupaka. S tim ciljem izložićemo varijacionu metodu.

Varijaciona metoda

Primenom tzv. varijacione metode može da se izvrši uopštavanje Šredingerove jednačine, koje ukazuje na put za traženje približnih rešenja. Pomnožimo obe strane jednačine (9.2.9a) sa $\Psi^*(\vec{r}_1, \ldots \vec{r}_N)$ i dobijeni izraz integralimo po celom prostoru:

$$\int\ldots\int \Psi^* H\Psi dr_1, \ldots, dr_N = E\int\ldots\int \Psi^*\Psi dr_1, \ldots, dr_N. \qquad (9.2.21)$$

Iz (9.2.21) sledi:

$$E = \frac{\int\ldots\int \Psi^* H\Psi dr_1, \ldots, dr_N}{\int\ldots\int \Psi^*\Psi dr_1, \ldots, dr_N}. \qquad (9.2.22)$$

Ako je, što je uobičajeno, talasna funkcija Ψ normirana, imenilac izraza na desnoj strani jednačine (9.2.22) jednak je jedinici. Izraz (9.2.22) je, dakle, ekvivalentan Šredingerovoj jednačini. Pretpostavićemo sada da se na desnoj strani jednačine (9.2.22), umesto tačne talasne funkcije Ψ sistema koji se posmatra, javlja neka približna talasna funkcija Φ. U tom slučaju veličina s leve strane jednačine (9.2.22) predstavlja očekivanu vrednost energije $< E >$:

$$\langle E\rangle = \frac{\int\ldots\int \Phi^* H\Phi dr_1, \ldots, dr_N}{\int\ldots\int \Phi^*\Phi dr_1, \ldots, dr_N}. \qquad (9.2.23)$$

Razlika između izraza (9.2.22) i (9.2.23) može matematički (na jeziku funkcionalne analize) da se iskaže na sledeći način: tačno rešenje Šredingerove jednačine, talasna funkcija Ψ, definisana je, u opštem slučaju, u prostoru beskonačnih dimenzija F (Hilbertov prostor), a približna talasna funkcija Φ u nekom potprostoru F' konačnih dimenzija. Na osnovu varijacione teoreme, zadovoljavanje uslova $\delta < E > = 0$, pri čemu δ označava varijaciju, ekvivalentno je rešavanju Šredingerove jednačine u tom potprostoru F'. Drugim rečima, nalaženjem varijacije izraza za očekivanu

vrednost energije $< E >$, uz izjednačavanje ove varijacije s nulom, dobijaju se uslovi koje zadovoljava najbolja približna funkcija Φ iz potprostora F'.

U praksi se obično postupa na jedan od sledeća dva načina:

a) pretpostavi se da funkcija Φ zavisi od izvesnog broja parametara *a, b*,... pa se iz uslova $\partial\langle E\rangle / \partial a = 0, \partial\langle E\rangle / \partial b = 0, \ldots$ određuju najbolje vrednosti parametara *a*, *b*, itd.,

b) funkcija Φ predstavi se u obliku linearne kombinacije konačnog broja izabranih funkcija (to su tzv. bazisne funkcije) $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n$, $\Phi = \sum_{i=1}^{n} c_i \varphi_i$, pri čemu se najbolje vrednosti koeficijenata razvoja $c_1, c_2, \ldots c_n$ dobijaju rešavanjem sistema linearnih jednačina koje slede iz uslova $\partial\langle E\rangle / \partial c_1 = 0, \partial\langle E\rangle / \partial c_n = 0$. Ako bi broj bazisnih funkcija bio beskonačan, optimalna funkcija Φ bila bi identična tačnom rešenju Šredingerove jednačine, Ψ. Pošto u praksi mora da se radi s bazisima konačnih (i što je moguće manjih) dimenzija, važno je da se odabere pogodni bazis, tako da linearna kombinacija relativno malog broja takvih funkcija bude dobra aproksimacija tačnoj talasnoj funkciji.

Može da se pokaže da je energija osnovnog stanja bilo kog atoma izračunata pomoću varijacione metode uvek gornja granica ($\geq$) tačne energije. Ovo daje mogućnost za ocenjivanje relativne tačnosti različitih proračuna. Od dva proračuna (s različitim funkcijama Φ) tačniji je onaj koji daje nižu energiju. Međutim, veličina apsolutne greške ne može da se proceni. Može, takođe, da se pokaže da je očekivana vrednost energije $< E >$ bliža tačnoj vrednosti E nego približna talasna funkcija Φ tačnom rešenju Šredingerove jednačine, Ψ.

9.2.3 Primena varijacione metode na He atom

Potražićemo sada približno rešenje Šredingerove jednačine za He atom primenom varijacione metode. Na samom početku izračunaćemo izraz za očekivanu vrednost energije (9.2.23), pri čemu ćemo koristiti egzaktan (nerelativistički) Hamiltonov operator $H = h_1 + h_2 + h_{12}$ [jednačina (9.2.11)], a kao približnu talasnu funkciju Φ uzećemo funkciju Ψ (9.2.19), koja odgovara modelu nezavisnih elektrona. Kako je približna funkcija unapred zadata (ne zavisi ni od kakvih parametara podložnih menjanju) ovde nije reč o uobičajenom slučaju kod varijacionog računa. Namera nam je da pokažemo da pomoću izraza (9.2.23), s prilično proizvoljnom talasnom funkcijom, mogu da se dobiju dosta dobre vrednosti energije (pogledati poslednju rečenicu prethodnog poglavlja).

Postupak izvođenja izraza za $< E >$ pokazaćemo u kratkim crtama. Kao i u slučaju vodonikovog atoma, pogodno je da sa Dekartovih pređe na sferne koordinate:

$$\{x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2\} \rightarrow \{r_1, \theta_1, \varphi_1, r_2, \theta_2, \varphi_2\} .$$

Element zapremine za integraljenje u izrazu (9.2.23) postaje;

$$dV_1 \cdot dV_2 = r_1^2 \sin\theta_1 dr_1 d\theta_1 d\varphi_1 r_2^2 \sin\theta_2 dr_2 d\theta_2 d\varphi_2 .$$

Kao približna talasna funkcija uzima se talasna funkcija (9.2.19) koja je i normirana, a zatim se izračunava integral:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{\pi^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^6 \iiiint\!\!\iint e^{-\frac{Z}{a_0}(r_1+r_2)}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta_1+\Delta_2) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r_{12}}\right]. \tag{9.2.24}$$

$$.e^{-\frac{Z}{a_0}(r_1+r_2)} r_1^2 r_2^2 \sin\theta_1 \sin\theta_2 dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 d\varphi_1 d\varphi_2$$

pri čemu su Laplasovi operatori Δ_1 i Δ_2 sada izraženi u sfernim koordinatama [izrazi slični jednačini (9.1.28) za H-atom], a r_{12} treba da se izrazi preko promenljivih r_1, r_2, θ_1, θ_2, φ_1, φ_2 . Kao rezultat takvog izračunavanja dobija se:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z^2e^2}{a_0} - 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z^2e^2}{a_0} + \frac{5}{8}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{a_0}. \tag{9.2.25}$$

Prvi član na desnoj strani jednačine (9.2.25) potiče od izraza za kinetičku energiju,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta_1+\Delta_2)$$

u Hamiltonovom operatoru. Drugi član odgovara interakciji elektrona i jezgra:

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right).$$

Ova dva člana predstavljaju Hamiltonov operator atoma helijuma u modelu nezavisnih elektrona i zbir njihovih doprinosa očekivanoj vrednosti energije je stvarno:

$$-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z^2e^2}{a_0},$$

kao i u jednačini (9.2.20). Treći član na desnoj strani jednačine (9.2.25) predstavlja doprinos energiji zbog uzajamnog odbijanja elektrona. Uvrštavanjem vrednosti za e, a_0 i Z (=2) u izrazu (9.2.25) dobija se kao očekivana vrednost energije -74,82 eV. Ovaj rezultat znatno je bliži eksperimentalnoj vrednosti od -78,6 eV i jasno pokazuje to da je neophodno da se uračuna međusobno odbijanje elektrona.

Sada ćemo uraditi jedan pravi varijacioni račun s približnom talasnom funkcijom za koju je pretpostavljen oblik:

$$\Phi = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\xi}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{\xi}{a_0}(r_1+r_2)}. \tag{9.2.26}$$

Izraz (9.2.26) razlikuje se od rešenja koje odgovara modelu nezavisnih elektrona po tome što je broj Z (=2) (naelektrisanje jezgra atoma helijuma) zamenjen paramet-

rom ξ čija se vrednost određuje u skladu s varijacionim principom. Uočimo da ova popravka talasne funkcije ima i fizičko opravdanje. Prema modelu nezavisnih čestica svaki elektron „oseća" delovanje celokupnog naelektrisanja jezgra, dakle Ze. Međutim, zbog prisustva drugog elektrona, naelektrisanje jezgra delimično je „zaklonjeno" i treba očekivati da svaki elektron „oseća" efektivni potencijal ξ, pri čemu bi ξ trebalo da bude između 1 (dejstvo jezgra maksimalno zaklonjeno) i 2 (interakcija sa jezgrom neometana drugim elektronom).

Potpuno istim postupkom kao i u prethodnom računu, za očekivanu vrednost energije dobija se funkcijom (9.2.26):

$$\langle E\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\xi^2 e^2}{a_0} - 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\xi Z e^2}{a_0} + \frac{5}{8}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\xi e^2}{a_0}. \tag{9.2.27}$$

Saglasno s varijacionim principom, najbolja vrednost parametra ξ nalazi se iz uslova:

$$\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\xi} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2\xi e^2}{a_0} - 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z e^2}{a_0} + \frac{5}{8}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{a_0} = 0 \tag{9.2.28}$$

na osnovu čega sledi:

$$\xi_{\min} = Z - \frac{5}{16} = \frac{27}{16}. \tag{9.2.29}$$

Najbolja vrednost ξ, $\xi_{\min}$, jeste, kao što smo i očekivali, broj koji ima vrednost između 1 i 2. Odgovarajuća energija dobija se uvrštavanjem izraza za $\xi_{\min}$ (9.2.29) u (9.2.27):

$$\langle E\rangle_{\min} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\xi^2_{\min} e^2}{a_0} - 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z\xi_{\min} e^2}{a_0} + \frac{5}{8}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\xi_{\min} e^2}{a_0} = -2,85\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{a_0} = -77,57\,eV \tag{9.2.30}$$

čime se približava eksperimentalnoj vrednosti (-78,6 eV) toliko da je relativna greška reda veličine 1%. Ovde treba naglasiti da su obe očekivane vrednosti energije [s približnom funkcijom (9.2.19) i (9.2.26)], dobijene korišćenjem egzaktnog Hamiltonovog operatora, iznad eksperimentalne (tačne) vrednosti, pri čemu bolja (fleksibilnija) približna talasna funkcija (9.2.26) vodi do rešenja koje je u boljoj saglasnosti sa eksperimentom.

Slaganje rezultata za očekivanu vrednost energije koji su dobijeni u ovim jednostavnim računima, sa odgovarajućom eksperimentalnom vrednošću, u stvari, i nije tako dobro kako bi se, na osnovu srazmerno male relativne greške ($\sim 1\%$), moglo zaključiti. Pri tome, treba imati u vidu da se u (spektroskopskim) eksperimentima ne mere neposredno apsolutne energije, već da se mere razlike između energija različitih stanja, a ove su same obično reda veličine 1% od ukupne energije. To znači da je za tačno opisivanje višeelektronskih atomskih sistema potrebno primeniti finije postupke od ovih upravo prikazanih. O njima će biti reči u jednom od

sledećih poglavlja. Sada ćemo se posvetiti razmatranju uticaja spina elektrona na rešenja Šredingerove jednačine. Pokazaćemo, takođe, da je pri rešavanju Šredingerove jednačine za atome s više elektrona, neophodno uzeti u obzir da su elektroni identične čestice.

9.2.4 Uticaj spina na energiju i talasne funkcije atoma (He)

U prethodnom poglavlju uspeli smo da dosta tačno izračunamo energiju osnovnog stanja atoma helijuma. Da bi se, međutim, objasnili neki drugi eksperimentalni rezultati koji ukazuju na:

– postojanje singuletnih i tripletnih elektronskih stanja, pri čemu, u opštem slučaju, jednom singuletnom odgovara tripletno stanje niže energije,

– osnovno stanje He atoma je singuletno, bez odgovarajućeg energijski bliskog tripleta,

– zabranu spektralnih prelaza između singuleta i tripleta,

moraćemo pri rešavanju Šredingerove jednačine uključiti spin. Kao što je u poglavljima 5, 6 i 9.1 rečeno, kvantni broj spina pojedinačnog elektrona je 1/2, a projekcija spina na bilo koju izabranu osu (po dogovoru to je z-osa) može da ima vrednost $1/2\,\hbar$ ili $-1/2\,\hbar$. Svojstvena funkcija koja odgovara svojstvenoj vrednosti projekcije na z-osu $s_z = +1/2$ označava se sa α, a svojstvena funkcija koja odgovara svojstvenoj vrednosti projekcije $s_z = -1/2$ sa β. Kao što je ranije pomenuto, zbog spinorbitnog međudejstva (interakcije) nastaje dodatna energija:

$$\Delta E = f(r)\vec{l}\cdot\vec{s} \tag{9.2.31}$$

pri čemu je $f(\vec{r})$ funkcija položaja elektrona. Egzaktni Hamiltonov operator atoma trebalo bi da uključuje član prikazan jednačinom (9.2.31). Ovo bi značilo uključivanje i N spinskih (u slučaju N elektrona), pored 3 N prostornih koordinata, zbog čega bi se pokazalo kao nemoguće rastavljanje Šredingerove jednačine na jednu jednačinu koja zavisi samo od prostornih koordinata i drugu koja zavisi od spinskih promenljivih. S druge strane, uključivanje popravke (9.2.31) u Hamiltonov operator, dovelo bi do neznatne promene u energiji sistema, pa se zbog navedenih razloga, član (9.2.31) ne unosi u Hamiltonov operator.

Spin elektrona se ipak uzima u obzir i to kroz oblik talasne funkcije. Pretpostavlja se da ukupna talasna funkcija zavisi kako od prostornih tako i od spinskih koordinata i predstavlja se u obliku proizvoda dve funkcije. Jedna od tih funkcija zavisi samo od spinskih, a druga samo od prostornih koordinata:

$$\Psi(\vec{r},\vec{s}) = \psi(\vec{r})\cdot\Theta(\vec{s}) \tag{9.2.32}$$

($\vec{r}$ predstavlja skup svih prostornih, a $\vec{s}$ skup svih spinskih koordinata). Cilj je da se na ovaj način rešavanje ukupne Šredingerove jednačine svede na rešavanje njenog prostornog dela (9.2.9).

Razmotrićemo sada kakav konkretni oblik funkcija (9.2.32) dvoelektronskog sistema, kao što je He atom, treba da ima. Sa $\Psi(1, 2)$ označićemo talasnu funkciju koja odgovara stanju kada se jedan elektron nalazi na jednom mestu, koordinata 1, a drugi elektron na nekom drugom mestu, koordinata 2. Stanje nastalo zamenom mesta dva elektrona opisuje se talasnom funkcijom $\Psi(2, 1)$. Pošto u fizičkim me-

renjima elektroni ne mogu da se razlikuju (oni su „identične čestice")[15], stanja opisana funkcijama $\Psi(1, 2)$ i $\Psi(2, 1)$ odgovaraju istoj fizičkoj situaciji. Dalje, fizički smisao ima kvadrat talasne funkcije (predstavlja gustinu verovatnoće nalaženja sistema u određenom stanju), tako da je:

$$\Psi^2(1, 2) = \Psi^2(2, 1) \tag{9.2.33}$$

na osnovu čega slede dve mogućnosti:

$$\Psi(1, 2) = \pm\Psi(2, 1). \tag{9.2.34}$$

Indeksi 1 i 2 odnose se na sve, kako prostorne tako i spinske koordinate elektrona označenih indeksima 1 i 2. Jednačine (9.2.33) i (9.2.34) su matematičke formulacije principa (zakona prirode): ako neka fizički merljiva veličina zavisi od koordinata identičnih čestica, tada rezultat merenja mora da bude nezavisan od permutacije tih koordinata. Sve čestice u prirodi mogu da se podele na *fermione* koji imaju **antisimetričnu** talasnu funkciju u odnosu na permutaciju koordinata:

$$\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$$

i *bozone,* kojima odgovara simetrična talasna funkcija:

$$\Psi(1, 2) = +\Psi(2, 1).$$

Fermioni imaju polubrojni spin, a bozoni celobrojni. Elektroni, protoni, neutroni kao i sve složene čestice (npr. atomi) koji sadrže neparan broj fermiona su fermioni.

Posledica antisimetrije talasne funkcije kod fermiona je **Paulijev princip isključenja,** po kojem dva elektrona u atomu ne mogu da imaju ista sva četiri kvantna broja.

Talasnu funkciju [videti (9.2.32)] atoma s dva elektrona, predstavićemo u obliku:

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1;\vec{r}_2, s_2) = \Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \cdot \Theta(s_1,s_2)\,. \tag{9.2.35}$$

Očekivana vrednost energije s nerelativističkim Hamiltonovim operatorom je tada:

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= \iiiint \Psi^*(\vec{r}_1, s_1;\vec{r}_2, s_2) H \Psi(\vec{r}_1, s_1;\vec{r}_2, s_2) d\vec{r}_1 ds_1 d\vec{r}_2 ds_2 = \\ &= \iint \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) H \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \iint \Theta^*(s_1, s_2)\Theta(s_1, s_2) ds_1 ds_2 = \\ &= \iint \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) H \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2\,.\end{aligned} \tag{9.2.36}$$

U jednačinama (9.2.36) korišćena je skraćena oznaka za integraljenje po prostornim promenljivim:

[15] Problem identičnih čestica postoji, u principu, i u makrosvetu, ali tu ima mnogo manju ulogu nego na atomskom nivou. Razlog je u tome što se makrotela odlikuju velikim brojem osobina, pa je teško da se nađu dva identična makroobjekta, osim u idealizovanim modelima. Suprotno ovome, mikročestice imaju ograničeni broj osobina (masa, naelektrisanje, spin) i problemi povezani sa nemogućnošću njihovog razlikovanja sasvim su realni.

$$\int d\vec{r}_1 = \iiint r_1^2 \sin\theta_1 dr_1 d\theta_1 d\varphi_1$$

i:

$$\int d\vec{r}_2 = \iiint r_2^2 \sin\theta_2 dr_2 d\theta_2 d\varphi_2 .$$

Jednakost poslednjeg i pretposlednjeg izraza u (9.2.36) posledica je normiranosti spinskog dela talasne funkcije:

$$\iint \Theta^*(s_1,s_2)\Theta(s_1,s_2)\, ds_1 ds_2 = 1 . \tag{9.2.37}$$

Dakle, spinski deo talasne funkcije nije uključen neposredno u proračun očekivane vrednosti energije. Spinski deo, međutim, posredno utiče jer određuje simetriju prostornog dela talasne funkcije $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$.

U dosadašnjim razmatranjima talasna funkcija helijumovog atoma predstavljana je u obliku proizvoda:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_1(\vec{r}_1) \cdot \phi_2(\vec{r}_2) \equiv \phi_1(1) \cdot \phi_2(2) . \tag{9.2.38}$$

U jednačinu (9.2.38) uvodimo skraćenu oznaku, $\phi_1(\vec{r}_1) \equiv \phi_1(1)$. Indeks 1 u ϕ_1 označava funkciju (npr. 1*s*, 2*p* itd.), a broj 1 u zagradi $(1) \equiv \vec{r}_1$ koordinatu elektrona 1. Ako se na desnoj strani jednačine (9.2.38) permutuju elektronske koordinate (odnosno elektroni), dobija se funkcija:

$$\phi_1(2) \cdot \phi_2(1) = \phi_2(1) \cdot \phi_1(2) \tag{9.2.39}$$

koja opisuje potpuno istu fizičku situaciju kao jednačina (9.2.38). Međutim, ni funkcije (9.2.38) i (9.2.39) ne zadovoljavaju, u opštem slučaju, uslov (9.2.33) odnosno uslov (9.2.34), jer pri permutaciji elektrona 1 i 2 ne ostaju nepromenjene do na znak. Kaže se da funkcije (9.2.38) i (9.2.39) nisu pravilno simetrizovane. Pomoću funkcija (9.2.38) i (9.2.39) mogu da se formiraju njihove linearne kombinacije:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1) \cdot \phi_2(2) + \phi_2(1) \cdot \phi_1(2)] \tag{9.2.40a}$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1) \cdot \phi_2(2) - \phi_2(1) \cdot \phi_1(2)] \tag{9.2.40b}$$

od kojih prva, očigledno, ne menja znak pri permutaciji elektrona 1 i 2, dok druga pri tome menja znak. Ovakve talasne funkcije su simetrizovane. Faktor $1/\sqrt{2}$ uveden je da bi funkcije ψ_s i ψ_a bile normirane (pretpostavlja se da su funkcije ϕ_1 i ϕ_2 već bile normirane).

Iako su elektroni fermioni, pa njihova talasna funkcija mora da bude antisimetrična u odnosu na permutacije, obe talasne funkcije (9.2.40a) i (9.2.40b), kako simetrična tako i antisimetrična, su od interesa jer one predstavljaju samo jedan deo (prostorni) ukupne talasne funkcije. Simetrija talasne funkcije osigurava se kom-

binovanjem antisimetrične prostorne talasne funkcije sa simetričnom spinskom i obrnuto.

Sada ćemo razmotriti oblik spinske talasne funkcije $\Theta(s_1, s_2)$. Ukupnu spinsku funkciju za sistem od dva elektrona, predstavićemo u obliku proizvoda jednoelektronskih spinskih funkcija. Postoje ukupno četiri mogućnosti:

spin (1)	spin (2)	ukupna spinska funkcija	
1/2	1/2	$\alpha(1)\alpha(2)$	
1/2	–1/2	$\alpha(1)\beta(2)$	(9.2.41)
–1/2	1/2	$\beta(1)\alpha(2)$	
–1/2	–1/2	$\beta(1)\beta(2)$.	

Druga i treća talasna funkcija predstavljaju isto fizičko stanje, a svaka za sebe nije ni simetrična ni antisimetrična u odnosu na permutacije elektrona. Zato se od njih obrazuje simetrična i antisimetrična kombinacija. Prema tome, četiri spinske funkcije su:

$$\Theta_1 = \alpha(1)\alpha(2)$$

$$\Theta_2 = \beta(1)\beta(2)$$

$$\Theta_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \qquad (9.2.42)$$

$$\Theta_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)].$$

Funkcije $\Theta_1, \Theta_2, \Theta_3$ simetrične su u odnosu na permutaciju elektrona, dok je funkcija Θ_4 antisimetrična. Faktor $1/\sqrt{2}$ uveden je u Θ_3 i Θ_4 da bi bile normirane.

Kombinovanjem spinskih (9.2.42) sa prostornim (9.2.40) funkcijama dobijaju se četiri antisimetrične ukupne talasne funkcije atoma helijuma (koristi se pravilo:

$$s \cdot s = s, \quad a \cdot a = s, \quad s \cdot a = a$$

sa s je označena simetrična, a sa a antisimetrična funkcija):

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1) \cdot \phi_2(2) - \phi_2(1) \cdot \phi_1(2)] \cdot \alpha(1)\alpha(2) \qquad (9.2.43a)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1) \cdot \phi_2(2) - \phi_2(1) \cdot \phi_1(2)] \cdot \beta(1)\beta(2). \qquad (9.2.43b)$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1) \cdot \phi_2(2) - \phi_2(1) \cdot \phi_1(2)] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \qquad (9.2.43c)$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1) \cdot \phi_2(2) + \phi_2(1) \cdot \phi_1(2)] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]. \qquad (9.2.43d)$$

Kako energija sistema (u okviru aproksimacija koje su usvojene) ne zavisi od spinskog dela talasne funkcije [videti jednačinu (9.2.36)], stanja opisana funkcijama Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 odgovaraće istoj energiji (trostruka degeneracija, tripletno stanje). Stanje opisano sa Ψ_4, ostaje nedegenerisano (singulet).

Pre nego što počnemo s proračunom energija koje odgovaraju singuletnom i tripletnom stanju He atoma, osvrnućemo se na proračun energije osnovnog stanja He atoma u odeljku 9.2.3. Pri izvođenju izraza za očekivanu vrednost energije, tamo se nije eksplicitno vodilo računa o tome da li je talasna funkcija simetrizovana. Međutim, kako smo određivali samo najniže stanje He atoma, za funkcije ϕ_1 i ϕ_2 uzeta je 1*s* orbitala vodonikovog atoma. Ako je, kao u tom slučaju, $\phi_2 = \phi_1 = \phi$, antisimetrična talasna funkcija postaje jednaka nuli, a simterična prostorna funkcija (9.2.40a) je ~ $\phi(1)\,\phi(2)$, tj. upravo onakva kakva je korišćena u računu. U odeljku 9.2.3, dakle, određena je energija singuletnog stanja opisanog funkcijom Ψ_4 (9.2.43d).

Očekivana vrednost energije (9.2.36) sada se izračunava sa funkcijama (9.2.43), odnosno (9.2.40) za opšti slučaj kada je $\phi_1 \neq \phi_2$:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{2}\iint [\phi_1(1)\cdot\phi_2(2)\pm\phi_2(1)\cdot\phi_1(2)]^* (h_1 + h_2 + h_{12}) \qquad (9.2.44)$$

$$[\phi_1(1)\phi_2(2)\pm\phi_2(1)\phi_1(2)]d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

pri čemu se znak „+" odnosi na singuletno, a znak „-" na tripletno stanje. Radi preglednosti, potražićemo posebno očekivane vrednosti za h_1, h_2 i h_{12}. Pri tome, koristimo činjenicu da operator h_1 sadrži samo koordinate i izvode po koordinatama elektrona 1, što omogućuje da se dvostruki integral [u stvari šestostruki, videti primedbu posle jednačine (9.2.36)] rastavi na dva jednostruka (u stvari trostruka) integrala. Dalje, operator h_2 deluje samo na koordinate elektrona 2. Operator h_{12} uključuje koordinate oba elektrona i u tom slučaju razdvajanje dvostrukog integrala nije moguće:

$$\langle h_1\rangle = \frac{1}{2}\iint [\phi_1(1)\cdot\phi_2(2)\pm\phi_2(1)\cdot\phi_1(2)]^* h_1[\phi_1(1)\phi_2(2)\pm\phi_2(1)\phi_1(2)]d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 =$$

$$= \frac{1}{2}[\int\phi_1^*(1)h_1\phi_1(1)d\vec{r}_1\int\phi_2^*(2)\phi_2(2)d\vec{r}_2 \pm \qquad (9.2.45)$$

$$\pm\int\phi_2^*(1)h_1\phi_1(1)d\vec{r}_1\int\phi_1^*(2)\phi_2(2)d\vec{r}_2 \pm$$

$$\pm\int\phi_1^*(1)h_1\phi_2(1)d\vec{r}_1\int\phi_2^*(2)\phi_1(2)d\vec{r}_2 + \int\phi_2^*(1)h_1\phi_2(1)d\vec{r}_1\int\phi_1^*(2)\phi_1(2)d\vec{r}_2].$$

Pretpostavljamo da su funkcije ϕ_1 i ϕ_2 normirane:

$$\int\phi_1^*(1)\phi_2(1)d\vec{r}_1 = 0$$

tako da se izraz (9.2.45) svodi na:

$$\langle h_1 \rangle = \frac{1}{2}[\int \phi_1^*(1) h_1 \phi_1(1) d\vec{r}_1 + \int \phi_2^*(1) h_1 \phi_2(1) d\vec{r}_1]. \tag{9.2.46}$$

Ne ulazeći u to kolika je vrednost $< h_1 >$, utvrđujemo samo da je ona jednaka i za singuletno i za tripletno stanje [članovi s različitim znakom iz izraza (9.2.45) su iščezli]. Na potpuno isti način je:

$$\langle h_2 \rangle = \frac{1}{2}[\int \phi_2^*(2) h_2 \phi_2(2) d\vec{r}_2 + \int \phi_1^*(2) h_2 \phi_1(2) d\vec{r}_2]. \tag{9.2.47}$$

Za h_{12} dobija se:

$$\langle h_{12} \rangle = \frac{1}{2}[\int\int \phi_1^*(1)\phi_2^*(2) h_{12} \phi_1(1)\phi_2(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \pm$$

$$\pm \int\int \phi_2^*(1)\phi_1^*(2) h_{12} \phi_1(1)\phi_2(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \pm \int\int \phi_1^*(1)\phi_2^*(2) h_{12} \phi_2(1)\phi_1(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \tag{9.2.48}$$

$$+ \int\int \phi_2^*(1)\phi_1^*(2) h_{12} \phi_2(1)\phi_1(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2].$$

U izrazu (9.2.48) javljaju se dve vrste integrala:

$$J = \int\int \phi_1^*(1)\phi_2^*(2) h_{12} \phi_1(1)\phi_2(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 =$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int\int \frac{|\phi_1(1)|^2 e |\phi_2^2(2)^2| e}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \tag{9.2.49}$$

Jednačina (9.2.49) predstavlja tzv. Kulonov integral. Kako je kvadrat talasne funkcije gustina verovatnoće nalaženja elektrona u određenoj tački prostora, izraz $|\phi_1(1)|^2 e$ predstavlja gustinu naelektrisanja elektrona 1, a $|\phi_2(2)|^2 e$ gustinu naelektrisanja elektrona 2. Prema tome, relacija (9.2.49), opisuje Kulonovu interakciju „oblaka" naelektrisanja koji predstavljaju elektrone 1 i 2. Uočava se to da je brojna vrednost drugog Kulonovog integrala koji se javlja u izrazu (9.2.48):

$$J = \int\int \phi_2^*(1)\phi_1^*(2) h_{12} \phi_2(1)\phi_1(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 =$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int\int \frac{|\phi_2(1)|^2 e |\phi_1^2(2)^2| e}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \tag{9.2.50}$$

jednaka vrednosti integrala (9.2.49). Izraz:

$$K = \int\int \phi_2^*(1)\phi_1^*(2) h_{12} \phi_1(1)\phi_2(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \tag{9.2.51}$$

naziva se integral izmene. On nema klasičnu analogiju (levo od operatora h_{12}, pod integralom, elektron 1 nalazi se u stanju ϕ_2, a desno od operatora nalazi se u stanju ϕ_1) i posledica je simetrizovanja talasne funkcije.

Sabirajući izraze za $< h_1 >$ (9.2.46), $< h_2 >$ (9.2.47) i $< h_{12} >$ (9.2.48), dobija se za očekivanu vrednost energije He atoma:

$$\langle E \rangle = \langle h_1 \rangle + \langle h_2 \rangle + J \pm K \tag{9.2.52}$$

pri čemu se znak „+" u poslednjem članu odnosi na simetričnu linearnu kombinaciju prostornih funkcija, odnosno na singuletno stanje, a znak „-" na antisimetričnu prostornu kombinaciju, odnosno na tripletno stanje. Vrednost K uvek je pozitivna, tako da na osnovu jednačine (9.2.52) sledi da tripletno stanje leži za $2K$ ispod singuletnog stanja obrazovanog od istih jednoelektronskih prostornih funkcija ϕ_1 i ϕ_2. Izraz (9.2.52) pokazuje kako spin elektrona posredno utiče na energiju stanja atoma i onda kada Hamiltonov operator ne sadrži spinske koordinate.

Na kraju ovog poglavlja pokazaćemo da talasne funkcije [(9.2.43a) – (9.2.43d)] mogu da se predstave i u obliku jedne determinante ili linearne kombinacije nekoliko determinanti:

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_2(1)\alpha(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}; \tag{9.2.53a}$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\beta(1) & \phi_2(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\beta(2) & \phi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}; \tag{9.2.53b}$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_2(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix} + \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\beta(1) & \phi_2(1)\alpha(1) \\ \phi_1(2)\beta(2) & \phi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}; \tag{9.2.53c}$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_2(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix} - \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\beta(1) & \phi_2(1)\alpha(1) \\ \phi_1(2)\beta(2) & \phi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}. \tag{9.2.53d}$$

Svaka od determinanti u izrazima (9.2.53) predstavlja određenu elektronsku konfiguraciju, tj. raspored elektrona po raspoloživim prostorno – spinskim stanjima. Analiza izraza (9.2.43a) i (9.2.53a) za, npr. $\Psi_{1,}$ pokazuje da ova talasna funkcija predstavlja stanje atoma helijuma u kojem se jedan elektron nalazi u prostornoj orbitali ϕ_1 sa spinom1/2, a drugi u prostornoj ϕ_2 sa spinom, takođe, 1/2. Uvedimo sada pojam spin orbitale. Spinorbitala je proizvod jednoelektronske prostorne talasne funkcije (orbitala) i jednoelektronske spinske funkcije, α ili β. Ako se, na primer, elektron 1 nalazi u prostornoj orbitali ϕ_1 sa spinom 1/2, njegovo stanje predstavljeno je spinorbitalom koja se označava sa S_1:

$$S_1(1) = \phi_1(1)\alpha(1). \tag{9.2.54}$$

Po Paulijevom principu, u jednoj spinorbitali može da se nalazi samo **jedan** elektron.

Analiza talasne funkcije $\Psi_{1,}$ pokazuje to da kada bi elektroni 1 i 2 mogli da se razlikuju jedan od drugog, tada bismo mogli konstatovati i da se elektron 1, na primer, nalazi u spinorbitali $S_1 = \phi_1 \alpha$, a elektron 2 u spinorbitali $S_2 = \phi_2 \alpha$. Ukupna talasna funkcija koja bi odgovarala toj situaciji bila bi:

$$\Psi = S_1(1) \cdot S_2(2) = \phi_1(1)\alpha(1) \cdot \phi_2(2)\alpha(2) \tag{9.2.55}$$

što predstavlja proizvod dijagonalnih elemenata (tzv. Hartijev proizvod) determinante (9.2.53a). Postojalo bi, međutim, i stanje u kojem se elektron 1 nalazi u spinorbitali 2, a elektron 2 u spinorbitali 1:

$$\Psi' = S_2(1) \cdot S_1(2) = \phi_2(1)\alpha(1) \cdot \phi_1(2)\alpha(2). \tag{9.2.56}$$

Ovo stanje predstavlja proizvod „nedijagonalnih" (od levog donjeg ka desnom gornjem uglu) elemenata determinante (9.2.53a). Kako su, međutim, elektroni 1 i 2 identične čestice, talasne funkcije Ψ i Ψ' opisuju isto fizičko stanje, a talasna funkcija koja zadovoljava zahtev da menja znak pri permutaciji elektrona 1 i 2 je upravo njihova antisimetrična linearna kombinacija (9.2.43a), koja se dobija razvijanjem determinante (9.2.53a).

9.2.5 Atomi sa više elektrona

Šredingerova jednačina za atom sa N elektrona ima oblik (9.2.9):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{k=1}^{N}\Delta_k - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{r_k} + \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l\neq k}^{N}\frac{1}{r_{kl}}\right)\Psi(1, 2, \ldots, N) = E\Psi(1, 2, \ldots N) \tag{9.2.57}$$

pri čemu su sa 1,2,...N u talasnoj funkciji označeni skupovi **prostornih i spinskih** koordinata elektrona 1,2,...N. Hamiltonov operator koji se javlja u jednačini (9.2.57) može da se predstavi u obliku:

$$H = \sum_{k=1}^{N} h_k + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{2}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l\neq k}^{N}\frac{1}{r_{kl}} \tag{9.2.58}$$

pri čemu je:

$$h_k = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_k - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_k} \tag{9.2.59}$$

h_k opisuje kretanje k-tog elektrona u polju jezgra, nezavisno od prisustva ostalih elektrona. Ovaj operator sadrži samo koordinate tog k-tog elektrona i naziva se **jednoelektronski operator.** Prvi član na desnoj strani jednačine (9.2.58), koji predstavlja sumu ovakvih članova, naziva se jednoelektronski deo Hamiltonovog operatora. Drugi član na desnoj strani jednačine (9.2.58) uključuje parne interakcije elektrona jednog sa drugim i naziva se dvoelektronski deo Hamiltonovog operatora. Kao što je već više puta rečeno, Šredingerova jednačina (9.2.57) može da se reši analitički samo za atome slične vodoniku, pa u svim drugim slučajevima moramo potražiti pogodan način za njeno približno rešavanje. U ovom delu izložićemo osnovne ideje najčešće primenjivanog postupka za približno rešavanje jednačine (9.2.57), metode samousaglašenog polja, odnosno Hartri-Fokove metode.

Hartri-Fokova metoda zasniva se na varijacionom principu. Rešavanje Šredingerove jednačine (9.2.57) zamenjuje se nalaženjem uslova pri kojima varijacija izraza:

$$\langle E\rangle = \frac{\int\ldots\int\Phi^{*}\,(1, 2, \ldots, N)H\Phi(1, 2, \ldots, N)d\tau_1, \ldots,d\tau_N}{\int\ldots\int\Phi^{*}\,(1, 2, \ldots, N)\Phi(1, 2, \ldots, N)d\tau_1, \ldots d\tau_N} \tag{9.2.60}$$

postaje jednaka nuli. Pri tome je H Hamiltonova funkcija (9.2.58), Φ je približna talasna funkcija, a $d\tau_i$ je četvorodimenzioni zapreminski element:

$$d\tau_i = dx_i dy_i dz_i ds_i.$$

Na osnovu iskustva s atomom helijuma može da se zaključi da sa talasnom funkcijom tipa:

$$\Phi = S_1(1)S_2(2)\ldots S_N(N) \tag{9.2.61}$$

pri čemu S_1, S_2, S_N predstavljaju jednoelektronske talasne funkcije, mogu da se dobiju dosta dobre svojstvene vrednosti Šredingerove jednačine atoma. Funkcija (9.2.61) odgovara, po svom obliku, talasnoj funkciji atoma sa N elektrona koji se međusobno razlikuju i kreću se nazavisno jedan od drugog. Kako su elektroni, međutim, identične čestice, potrebno je funkciju (9.2.61) „antisimetrizovati". Time se postiže da ovako formirana funkcija pri permutaciji bilo koja dva elektrona samo promeni znak. Zbog toga se uopštava postupak predstavljanja talasne funkcije u obliku determinanti. Funkciju (9.2.61) zamenjujemo tzv. Slejterovom determinantom:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} S_1(1) & S_2(1) & \ldots\ldots & S_N(1) \\ S_1(2) & S_2(2) & \ldots\ldots & S_N(2) \\ . & . & \ldots\ldots & . \\ . & . & \ldots\ldots & . \\ S_1(N) & S_2(N) & \ldots\ldots & S_N(N) \end{vmatrix}. \tag{9.2.62}$$

Kada se determinanta (9.2.62) razvije dobija se $N!$ sabiraka, od kojih se svaki sastoji od proizvoda N spinorbitala. Svaki od ovih proizvoda predstavlja određenu raspodelu N numerisanih elektrona po N raspoloživih spinorbitala. Jedan od tih sabiraka je i proizvod dijagonalnih elemenata determinante (9.2.62). Ovaj proizvod naziva se Hartrijev i predstavlja funkciju (9.2.61). Faktor $1/N!$ uveden je da bi funkcija Φ bila normirana (pretpostavljeno je da su spinorbitale već normirane).

Uočimo i kako se pišu Slejterove determinante. U prvu vrstu upisujemo sve raspoložive spinorbitale S_1, S_2,.....S_N pored svake od njih stavljajući u zagradu oznaku (1). To znači da elektron 1 može da se nađe u bilo kojoj od spinorbitala. U drugu vrstu ponovo ispisujemo sve spinorbitale, ali sada sa oznakom (2), itd. Iz determinantnog oblika funkcije Φ (9.2.62), odmah se vidi da ona ispunjava Paulijev princip: ako bi dve spinorbitale bile iste, npr. $S_1 = S_2$, tada bi odgovarajuće kolone u determinanti (9.2.62) bile iste i cela determinanta bila bi jednaka nuli.

Korišćenjem funkcije oblika (9.2.62) uzima se u obzir da elektroni ne mogu međusobno da se razlikuju, ali je ostao problem uzajamne nezavisnosti (nekorelisanosti) njihovih kretanja.[16] Varijacioni princip pokazaće, međutim, put nalaženja najboljih, od svih mogućih, jednoelektronskih talasnih funkcija S_1, S_2, ...S_N.

Oblik Hartri-Fokovih jednačina znatno je jednostavniji za atome sa „zatvorenim ljuskama", tj. za atome sa parnim brojem elektrona smeštenih u $N/2$ prostornih orbitala, jednom sa spinom 1/2 drugi put sa spinom -1/2. Za takve atomske sisteme Slejterova determinanta (9.2.62) dobija oblik:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_1(1)\beta(1) & \phi_2(1)\alpha(1) & \phi_2(1)\beta(1) \ldots \phi_{N/2}(1)\alpha(1) & \phi_{N/2}(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_1(2)\beta(2) & \phi_2(2)\alpha(2) & \phi_2(2)\beta(2) \ldots \phi_{N/2}(2)\alpha(2) & \phi_{N/2}(2)\beta(2) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \phi_1(N)\alpha(N) & \phi_1(N)\beta(N) & \phi_2(N)\alpha(N) & \phi_2(N)\beta(N) \ldots & \phi_{N/2}(N)\alpha(N) \; \phi_{N/2}(N)\beta(N) \end{vmatrix} \tag{9.2.63}$$

Izračunavanjem očekivane vrednosti energije (9.2.60), posle izvesnih transformacija, dobija se tada:

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^{N/2} \langle h_1 \rangle + \sum_{i=1}^{N/2} \sum_{j=1}^{N/2} (2J_{ij} - K_{ij}). \tag{9.2.64}$$

Pri tome je:

$$\langle h_1 \rangle = \int \phi_i(k) h_k \phi_i(k) d\vec{r}_k \tag{9.2.65}$$

gde je h jednoelektronski operator (9.2.59). J_{ij} i K_{ij} su Kulonov integral i integral izmene, slični integralima (9.2.50) i (9.2.51):

$$J_{ij} = \iint \phi_i^*(k) \phi_j^*(l) \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_{kl}} \phi_i(k) \phi_j(l) dr_k dr_l \tag{9.2.66}$$

$$K_{ij} = \iint \phi_i^*(k) \phi_j^*(l) \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_{kl}} \phi_i(l) \phi_k(l) dr_k dr_l. \tag{9.2.67}$$

Variranjem oblika prostornih orbitala ϕ_1, ϕ_2,...., $\phi_{N/2}$ nalazi se da se minimum izraza (9.2.64) dobija kada prostorne orbitale zadovoljavaju tzv. Hartri-Fokove jednačine:

$$F\phi_i = \varepsilon_i \phi_i \tag{9.2.68}$$

$i = 1,2,...N/2$, a F je Fokov operator:

[16] Talasna funkcija tipa (9.2.62) odgovarala bi tačnom rešenju Šredingerove jednačine (9.2.57) u kojoj bi se izostavio dvoelektronski deo Hamiltonovog operatora.

$$F = h_k + \sum_{j=1}^{N/2} (2J_j - K_j) \tag{9.2.69}$$

pri čemu su J_j i K_j definisani jednačinama:

$$J_j(k)\phi_i(k) = \iint \phi_j^*(l) \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_{kl}} \phi_j(l) dr_l \times \phi_i(k) \tag{9.2.70}$$

$$K_j(k)\phi_i(k) = \iint \phi_i^*(l) \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_{kl}} \phi_i(l) dr_l \times \phi_j(k) \tag{9.2.71}$$

i nazivaju se Kulonov operator i operator izmene, redom.

Hartri-Fokove jednačine predstavljaju sistem jednačina za koje bi na osnovu oblika (9.2.68) moglo da se zaključi da predstavljaju svojstvene jednačine Fokovog operatora. (Rezultat dejstva operatora F na funkciju ϕ_i je ista ta funkcija ϕ_i pomnožena brojem ε_i. Međutim, na osnovu jednačina (9.2.69), (9.2.70) i (9.2.71) sledi da i sam Fokov operator zavisi od funkcija ϕ_1, ϕ_2,..., $\phi_{N/2}$ koji se dobijaju rešavanjem Hartri-Fokovih jednačina. Stoga se Hartri-Fokove jednačine (9.2.68), moraju rešavati iterativno. To znači da se prvo izabere neki početni skup funkcija ϕ_1^0, ϕ_2^0,..., $\phi_{N/2}^0$, pa se pomoću njih, a na osnovu jednačina (9.2.69) – (9.2.71) konstruiše odgovarajući Fokov operator F^0. Zatim se taj operator uvrsti u jednačine (9.2.68) i njihovim rešavanjem odredi se novi skup funkcija ϕ_1^1, ϕ_2^1, $\phi_{N/2}^1$. Pomoću ovih funkcija konstruiše se novi Fokov operator F^1 i uvrsti u Hartri-Fokove jednačine (9.2.68), pa se rešavanjem dobija poboljšani skup funkcija ϕ_1^2, ϕ_2^2, $\phi_{N/2}^2$. Postupak se ponavlja do samousaglašavanja, tj. dok se funkcije ϕ_1, ϕ_2,..., $\phi_{N/2}$ (ili vrednosti parametra ε_i) u dve uzastopne iteracije više bitno ne razlikuju.

Po svojoj matematičkoj strukturi Hartri-Fokove jednačine su integrodiferencijalne jednačine, veoma teške za rešavanje. Rešavaju se numerički ili se funkcije ϕ_1, ϕ_2,..., $\phi_{N/2}$ predstavljaju u obliku lineranih kombinacija pojedinih elementarnih funkcija što vodi do sistema algebarskih jednačina (Rothanova metoda).

Ukupna energija atoma sa zatvorenim ljuskama u Hartri-Fokovoj metodi data je sledećom jednačinom:

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^{N/2} (\langle h_i \rangle + \varepsilon_i). \tag{9.2.72}$$

Fokov operator sastoji se iz dva dela: jednoelektronskog operatora h_k koji opisuje kretanje k-tog elektrona u polju jezgra i člana $\sum_{i=1}^{N/2} (2J_j - K_j)$ koji predstavlja interakciju tog elektrona s usrednjenim poljem ostalih elektrona. U osnovi Hartri-Fokove metode leži, dakle, zamena tačnih parnih interakcija između elektrona interakcijama pojedinačnog elektrona s usrednjenim poljem ostalih elektrona. Posledica ove aproksimacije jeste da je tačnost Hartri-Fokove metode ograničena (greška izračunate energije je oko 1%). Zbog toga se Hartri-Fokov račun obično

upotpunjava primenom metoda koje uzimaju u obzir popravku kretanja elektrona. Takva je npr. metoda interakcije konfiguracija.

9.2.6 Periodni sistem elemenata

Kao što je poznato, Mendeljejev [Dimitrij Ivanović Mendeleev (1834–1907)] je 1869. godine postavio periodni sistem elemenata, posle sveobuhvatne i detaljne analize fizičkih i hemijskih svojstava tada poznatih elemenata. Upoređujući osobine elemenata, uočio je periodičnu zavisnost fizičkih i hemijskih svojstava elemenata od atomske mase. Tako je, konačno, elemente poređao po rastućim atomskim masama u obliku horizontalnih nizova – perioda, koje je prekidao, a zatim započinjao ređanje elemenata u novoj periodi ali tako da se, u vertikalnim nizovima – grupama, nađu jedan ispod drugog elementi koji pokazuju slična hemijska svojstva. Kao što je pomenuto, uočena je periodičnost pojavljivanja elemenata sa sličnim hemijskim osobinama. Danas se ova periodičnost objašnjava periodičnošću javljanja sličnih elektronskih konfiguracija u odgovarajućim atomima.

Primenom principa izgradnje periodnog sistema utvrdićemo sada broj elektrona koje u orbitalama vodonikovog tipa sadrži atom određenog elementa u svom osnovnom stanju. Tako se dobija elektronska konfiguracija atoma svakog elementa u stanju najniže energije. Princip izgradnje periodnog sistema zasnovan je na sledećim pretpostavkama:

a–elektronska stanja su kvantovana,

b–elektronska stanja popunjavaju se u skladu s Paulijevim principom,

c–osnovno stanje svakog atoma jeste stanje s najnižom energijom.

Uz ove zahteve, potreban je i poredak orbitala po energijama i on je sledeći:

Tabela 9.2.1 Redosled orbitala po energijama

1*s*	2*s*	2*p*	3*s*	3*p*	4*s*	3*d*	4*p*	5*s*	4*d*	5*p*	6*s*	5*f*

Brojevi 1, 2, 3 itd. ispred oznake orbitale označavaju vrednost glavnog kvantog broja. U prikazanom nizu najnižu vrednost energije (odnosno najveću po apsolutnoj vrednosti) ima 1*s* orbitala. Niža vrednost glavnog kvantnog broja ne znači obavezno i nižu vrednost određene orbitale u odnosu na neku drugu orbitalu s većim glavnim kvantnim brojem. Tako orbitala 4*s* ima nižu vrednost energije od 3*d*. Dakle, orbitale se popunjavaju redosledom naznačenim u Tabeli 9.2.1, pa se tako dobija elektronska konfiguracija atoma u njegovom osnovnom stanju ili u stanju najniže energije. U Tabeli 9.2.2 naznačen je najveći broj elektrona u datoj orbitali. Ovaj broj elektrona određen je Paulijevim principom isključenja.

Tabela 9.2.2 Najveći broj elektrona po orbitalama

s	*p*	*d*	*f*
2	6	10	14

Dakle, nivo *s* može da primi najviše dva elektrona, nivo *p* 6 elektrona (jer postoje tri *p* orbitale i to p_x, p_y i p_z), nivo *d* 10 elektrona, itd.

Počećemo sa vodonikom, koji ima jedan elektron. Kada se atom vodonika nalazi u osnovnom stanju, ovaj elektron je u 1*s* orbitali, pa se elektronska konfiguracija atoma vodonika u osnovnom stanju označava na sledeći način:

$$\mathrm{H} \quad (1s)$$

gde je broj elektrona u orbitali označen kao gornji indeks. Atom helijuma u osnovnom stanju ima 2 *s* elektrona, pa je njegova elektronska konfiguracija:

$$\mathrm{He} \qquad (1s)^2.$$

Dalje, u periodnom sistemu dolaze litijum koji ima 3 elektrona, berilijum sa 4 i bor sa 5 elektrona. U osnovnom stanju njihove elektronske konfiguracije su sledeće:

$$\mathrm{Li}: \ (1s)^2\,(2s)^1; \quad \mathrm{Be}: \ (1s)^2\,(2s)^2; \quad \mathrm{B}: \ (1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^1.$$

Sledeći u periodnom sistemu je ugljenik s elektronskom konfiguracijom:

$$\mathrm{C}: \ (1s)^2\,(2s)^2\,(2p_x)^1\,(2p_y)^1.$$

Kako se na osnovu elektronske konfiguracije može da vidi, favorizovano je stanje sa po jednim (nesparenim) elektronom, u npr. $2p_x$ i $2p_y$ orbitali, u odnosu na mogućnost da se oba elektrona nađu u istoj orbitali. Važno je pri tome razumeti da su sve tri *p* orbitale, p_x, p_y i p_z (koje odgovaraju istom glavnom kvantnom broju) potpuno ravnopravne (ekvivalentne). Tako je za osnovno stanje ugljenikovog atoma verovatnoća nalaženja dva nesparena elektrona u p_x i p_y potpuno jednaka verovatnoći da oni budu u paru p_x i p_z ili u p_z i p_y. Ispisivanje elektronske konfiguracije ugljenika sa po jednim elektronom u p_x i p_y orbitali treba shvatiti kao konvenciju (stvar dogovora). Tako se dolazi do pretpostavke u okviru principa izgradnje periodnog sistema:

– elektroni najpre popunjavaju sve raspoložive orbitale određenog nivoa, pa se tek posle toga ove orbitale dopunjavaju do broja 2 (a najviše toliko elektrona mogu da prime). Ovakav način popunjavanja povoljniji je iz elektrostatičkih razloga;

– elektroni se slabije odbijaju kada pripadaju različitim *p* orbitalama nego kada su u istoj. Elektronska konfiguracija sledećeg elementa u periodnom sistemu, azota, je:

$$\mathrm{N}: \ (1s)^2\,(2s)^2\,(2p_x)^1\,(2p_y)^1\,(2p_z)^1.$$

U vezi s prethodnim izlaganjem je tzv. Hundovo pravilo koje kaže:

– atom u osnovnom stanju ima takvu elektronsku konfiguraciju koja može da sadrži najveći broj nesparenih elektrona. Spinovi ovakvih nesparenih elektrona međusobno su paralelni, što je energetski povoljnije. Dakle, *p* elektroni kod npr. ugljenika i azota imaju paralelne spinove. Dva elektrona u istoj orbitali, bilo p_x ili p_y, itd. moraju po Paulijevom principu, da imaju antiparalelne spinove, npr. kod atoma kiseonika:

$$O: \ (1s)^2\,(2s)^2\,(2p_x)^2\,(2p_y)^1\,(2p_z)^1.$$

Ako se istovremeno posmatra struktura periodnog sistema i popunjenost nivoa i podnivoa elektronima, vidi se da je *K* ($n = 1$) nivo potpuno popunjen elektronima zaključno s helijumovim atomom, kojim se završava i **prva** perioda. Popunjavanjem *L* nivoa ($n = 2$) počinje **druga** perioda koja se završava internim elementom neonom, kod kojeg je i *L* nivo potpuno popunjen elektronima, što odgovara sledećoj elektronskoj konfiguraciji:

$$\mathrm{Ne}: \ (1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6.$$

Neon ima 10 elektrona (kada je atom neona neutralan), što znači da je njegov redni broj $Z = 10$.

Za sve sledeće elemente kod kojih je $Z > 10$, elektronske konfiguracije dobijaju se kada se na konfiguraciju neona elektroni dodaju redom u $3s$, $3p$, $4s$… orbitale. Tako, natrijum (Na) sa 11 elektrona ima konfiguraciju:

$$\text{Na} \quad (Z = 11): \quad (1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^1 \quad \equiv \quad [\text{Ne}]\,(3s)^1$$

slično atomu litijuma, čija konfiguracija može da se napiše na sledeći način:

$$\text{Li} \quad (Z = 3): \quad [\text{He}]\,(2s)^1.$$

Sličnost u osobinama alkalnih atoma potiče od toga što svi alkalni atomi imaju po jedan nespareni s elektron, dok je ostatak elektronske konfiguracije isti kao konfiguracija odgovarajućeg inertnog gasa. Slično može da se kaže i za zemnoalkalne atome, čije su osobine određene konfiguracijom 2 spoljašnja elektrona – $(s)^2$. Inertni (plemeniti) gas argon sa 18 elektrona, poslednji je element u **trećoj** periodi i njegovi $3s$ i $3p$ podnivoi potpuno su popunjeni elektronima.

Četvrta perioda počinje kalijumom, čiji je devetnaesti elektron u $4s$, dok ostatak konfiguracije odgovara elektronskoj konfiguraciji argona. Očigledno je da energijski povoljnije (dublje) leži podnivo $4s$ nego $3d$ čije popunjavanje počinje sa skandijumom (Sc), a završava se sa cinkom (Zn) i to tek pošto se potpuno popuni nivo $4s$ – konfiguracija elementa kalcijuma:

$$\text{Ca} \quad (Z = 20): \quad (1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(4s)^2 \quad \equiv \quad [\text{Ar}]\,(4s)^2.$$

Zaključno sa cinkom završava se popunjavanje $3d$ podnivoa:

$$\text{Zn} \quad (Z = 30): \quad (1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(3d)^{10}\,(4s)^2 \quad \equiv \quad [\text{Ar}]\,(3\text{d})^{10}(4s)^2.$$

Kod galijuma (Ga) počinje popunjavanje $4p$ podnivoa, koji je potpuno popunjen elektronima zaključno sa elementom kriptonom (Kr):

$$\text{Kr} \quad (Z = 36): \quad (1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(3d)^{10}\,(4s)^2\,(4p)^6.$$

Tako se u četvrtoj periodi nalazi 18 elemenata.

Peta perioda počinje rubidijumom (Rb) čiji se 37. elektron nalazi u $5s$ nivou. Zatim sledi stroncijum (Sr) koji ima 2 elektrona u $5s$ nivou. $4d$ nivo počinje (kao i u slučaju $3d$ nivoa) da se popunjava posle $5s$ nivoa. Elementi koji sadrže različit broj elektrona (1–10) u d nivou nazivaju se „prelazni". Složenost ponašanja ovih elemenata posledica je njihove elektronske konfiguracije. Počevši od itrijuma (Y) preko Zr (cirkonijuma), niobijuma (Nb), molibdena (Mo), itd. do paladijuma (Pd) popunjava se $4d$ podnivo. Ovi „prelazni" elementi imaju različit broj d elektrona (od 1 do 10), dok u $5s$ nivou imaju 1 ili 2 elektrona. Izuzetak je paladijum koji ima potpuno popunjen $4d$ nivo i u $5s$ nivou nema elektrona:

$$\text{Pd} \quad (Z = 46): \quad (1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(3d)^{10}\,(4s)^2\,(4p)^6\,(4d)^{10}.$$

Posle paladijuma dolazi srebro sa 47 elektrona, a njegov 47. elektron je u $5s$ nivou. Sledi kadmijum (Cd) sa 2 elektrona u $5s$ nivou, posle čega se popunjava $5p$ nivo, počevši od indijuma (In) koji sadrži 1 elektron u $5p$ nivou, do ksenona (Xe) koji ima potpuno popunjen $5p$ nivo:

$$\text{Xe} \quad (Z = 54): \quad (1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(3d)^{10}\,(4s)^2\,(4p)^6\,(4d)^{10}\,(5s)^2\,(5p)^6.$$

Ksenonom se završava peta perioda sa 18 elemenata.

Šesta perioda počinje cezijumom. Posle cezijuma (Cs) i barijuma (Ba) koji sadrže po 1 odnosno 2 elektrona u 6*s* nivou i lantana (La) koji ima i jedan elektron u 5*d* nivou:

$$\text{La} \quad (Z = 57): \quad [\text{Xe}]\,(5d)^1\,(6s)^2$$

počinje popunjavanje nepopunjenog 4*f* nivoa. Tako nastaje grupa *f* elemenata, koji se nazivaju lantanoidi. Sam lantan nije lantanoid jer ne sadrži elektrone u *f* nivou. *f* nivo može da primi 14 elektrona, a broj elektrona u *f* nivou kod različitih lantanoida kreće se od 2 do 14. U hemijskom pogledu lantanoidi su međusobno veoma slični i veoma teško mogu da se razdvoje nekim hemijskim postupcima. Ovakva sličnost potiče od istovetne elektronske konfiguracije spoljnih podnivoa, 5*s*, 5*p* i 6*s*. Najlakši lantanoid je element cer (Ce) sa elektronskom konfiguracijom:

$$\text{Ce} \quad (Z = 58): \quad [\text{Xe}]\,(4f)^2\,(6s)^2.$$

Pošto se popuni 4*f* nivo, počinje popunjavanje 5*d* nivoa (koji može da primi ukupno 10 elektrona), a zatim 6*p* nivoa. Zaključno s radonom završava se šesta perioda koja sadrži 32 elementa. Radon ima sledeću elektronsku konfiguraciju:

$$\text{Rn} \quad (Z = 86): \quad [\text{Xe}]\,(4f)^{14}\,(5d)^{10}\,(6s)^2\,(6p)^6.$$

Sedma perioda počinje radioaktivnim elementom francijumom, koji ima jedan elektron u 7*s* nivou i, prema tome, strukturu alkalnih atoma. Zatim sledi radijum sa 2 elektrona u 7*s* nivou, pa aktinijum sa 89 elektrona, koji dobija jedan elektron u 6*d* nivou i ima konfiguraciju sličnu lantanu. Posle torijuma, sa 2 elektrona u 6*d* nivou, dolazi grupa *f* elemenata ili aktinoida kod kojih počinje popunjavanje 5*f* nivoa. Slično lantanoidima i aktinoidi su međusobno srodni i teško mogu da se odvoje jedan od drugog.

Istaknimo još jednom da su hemijska i fizičkohemijska svojstva elemenata određena njihovom elektronskom konfiguracijom. Tako se, elementi prve grupe periodnog sistema odlikuju jednim elektronom u spoljašnjem *s* podnivou. Metalna svojstva ovih elemenata potiču od relativno lakog otpuštanja ovog elektrona koji je slabo vezan za jezgro. Tako, alkalni atomi imaju međusobno bliske i, u odnosu na druge elemente, niže vrednosti energija jonizacije, videti Sliku 4.3.5. S druge strane, elementi osme grupe imaju potpuno popunjene nivoe i zato teško stupaju u hemijske reakcije, inertni su. Oni imaju i najveće energije jonizacije. U levom delu periodnog sistema preovlađuju elementi s metalnim svojstvima. Oni relativno lako otpuštaju elektrone i imaju mali afinitet za primanje elektrona, za razliku od nemetala kod kojih je situacija obrnuta.

Oznake za pojedini hemijski element prikazanog periodnog sistema elemenata, pored simbola elementa, sadrže njegov redni broj (oznaka gore) i relativnu atomsku masu $Ar(E)$ koja se definiše kao:

$$A_r(E) = \sum_A x({}^AE)\frac{m_a({}^AE)}{m_u}$$

gde je $x(^{A}E)$ molski udeo jezgra ^{A}E u smeši izotopa, m_a je masa atoma određenog izotopa jednog elementa, a m_u je masa koja se uzima za jedinicu mase i koja je jednaka 1/12 mase izotopa ugljenika ^{12}C.

Iako u odnosu na doba u kome je živeo i radio Mendeljejev, periodni sistem elemenata sadrži mnogo više elemenata, tabela hemijskih elemenata još uvek nije potpuna. Novi, teški ili superteški elementi ne postoje u prirodi ali se mogu sintetisati u laboratorijama u kojima se ostvaruju uslovi za odvijanje različitih nuklearnih reakcija kao i fuzije (sjedinjavanja) jezgra atoma. Ovi teški elementi se nazivaju i transuranski (redni broj im je veći od rednog broja urana čiji je redni broj 92) ili transfermijevski u odnosu na fermijum sa rednim brojem 100. Poslednjih godina, naučnici su uspeli da dobiju mnoge teške elemente, a najteži je bio onaj sa rednim brojem 118. Dobijena jezgra su nestabilna (videti poglavlja 10 i 11) sa kratkim vremenom života (smatraju se izuzetno stabilnim kada je to vreme desetak sekundi). Pri raspadu (to je obično α-raspad) dobija se jezgro elementa čiji je redni broj za dve jedinice manji i tako redom. U takvom nizu su 1999. godine dobijeni najteži do tada poznati teški elementi rednog broja 118, 116 i 114. Pored toga što kratko žive, superteški elementi se dobijaju i u vrlo malom prinosu, pa metode za njihovu detekciju i proučavanje predstavljaju poslednju reč nauke i tehnike. Niz elemenata do rednog broja 118 nije potpun. Još se čeka na otkriće jezgara sa rednim brojem 113, 115, 117. Kao što je u svoje vreme, raspolažući skromnim sredstvima za istraživanje ali i mnoštvom podataka o hemijskim elementima i jedinjenjima koji su nastali kao rezultat vrednog rada generacija hemičara, Mendeljejev uspeo da predvidi i postojanje nekih elemenata (npr. inertnih) rezervisavši mesto za njih u periodnom sistemu, tako i danas na osnovu modernih teorija naučnici predviđaju mogućnost sinteze (detekcije i ispitivanja) elemenata sve do rednog broja 126. Istaknimo još i to da je element sa rednim brojem 101 nazvan Mendeljejevijum (Md) u čast samoga Mendeljejeva.

Nazivi elemenata, počevši od elementa sa rednim brojem 104, obrazuju se, prema preporuci Međunarodne unije za čistu i primenjenu hemiju, od korena latinskog naziva za odgovarajući (redni) broj koji element ima, npr. unillquadium (Unq-104), unillpentium (Unp-105) itd. Postoje i druge varijante označavanja elemenata, američka i ruska, po kojima elementi dobijaju imena po čuvenim naučnicima. Tako se u američkoj varijanti npr., element sa rednim brojem 106 naziva seaborgium (Sg) prema Glenu Siborgu (Glenn Seaborg) istaknutom naučniku koji se bavio proučavanjem i sintezom jezgara teških elemenata na univerzitetu u Berkliju. Sledeći u periodnom sistemu je bohrium, prema Nilsu Boru (Bh, redni broj 107).

Primeri

Primer 9.2.1 Izvesti Hajzenbergovu relaciju neodređenosti $\Delta x \Delta p \geq h/4\pi$. Uzeti da su srednje vrednosti kvadrata koordinate i impulsa prikazane jednačinama:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x^2 \Psi \, dx, \quad \langle p_x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{p}_x^2 \, \Psi \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi \, dx.$$

Uzima se pozitivno definitni integral:

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| x\Psi + \lambda\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|^2 dx \geq 0 \tag{9.2.73}$$

pri čemu je λ realan broj. Jednačina (9.2.73) može da se napiše na drugi način u obliku:

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(x\Psi^* + \lambda\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \left(x\Psi + \lambda\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx = \tag{9.2.74}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx + \lambda\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) (x\Psi) dx + \lambda\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} (x\Psi^*) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx + \lambda^2\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx.$$

Parcijalnim integraljenjem drugi član na desnoj strani jednačine (9.2.74) pretvara se u:

$$\lambda\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) (x\Psi) dx = \lambda\hbar (\Psi^* x \Psi) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \lambda\hbar \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \right]. \tag{9.2.75}$$

Prvi član na desnoj strani jednakosti (9.2.75) jednak je nuli jer talasna funkcija iščezava u beskonačnosti. Kada je talasna funkcija normirana, prvi član u srednjoj zagradi jednak je jedinici, dok je drugi član u srednjoj zagradi jednak trećem integralu s desne strane (9.2.74). Parcijalnim integraljenjem poslednjeg člana jednakosti (9.2.74) dobija se:

$$\lambda^2\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx = \lambda^2\hbar^2 \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \lambda^2\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx = \tag{9.2.76}$$

$$= \lambda^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \right) dx.$$

Uvrštavanjem (9.2.75), (9.2.76) i (9.2.73) dobija se:

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx - \lambda\hbar + \lambda^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi dx = \tag{9.2.77}$$

$$= \langle x^2 \rangle - \lambda\hbar + \lambda^2 \langle p_x^2 \rangle \geq 0$$

pri čemu su $\langle x^2 \rangle$ i $\langle p_x^2 \rangle$ srednje vrednosti kvadrata koordinate x i kvadrata kvantnomehaničkog operatora x-komponente impulsa. Kvantnomehanički operatori komponenata impulsa poznati su iz poglavlja 8.4 (jednačina 8.4.77). Operator pridružen

koordinati jednak je samoj koordinati. Jednačina (9.2.77) predstavlja kvadratnu jednačinu po λ. Ova nejednakost zadovoljena je kada je diskriminanta kvadratne jednačine manja (ili jednaka) od nule:

$$\hbar^2 - 4\langle x^2\rangle\langle p_x^2\rangle \le 0 \tag{9.2.78}$$

odakle sledi:

$$\langle x^2\rangle\langle p_x^2\rangle \ge \frac{1}{4}\hbar^2. \tag{9.2.79}$$

Relacija (9.2.79) povezuje međusobno srednje vrednosti kvadrata koordinate i impulsa. Ako su srednje vrednosti koordinate impulsa jednake nuli, tada su srednje vrednosti kvadrata ovih veličina jednake disperzijama njihovih vrednosti:

$$D = \sum_i f_i(x_i - \langle x\rangle)^2 = \sum_i f_i x_i^2 - 2\langle x\rangle\sum_i f_i x_i + \langle x\rangle^2\sum_i f_i = \tag{9.2.80}$$

$$= \langle x^2\rangle - 2\langle x\rangle^2 + \langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2.$$

U jednačini (9.2.80) definisana je disperzija D prema teoriji verovatnoće, pri čemu je f_i relativna učestanost ili verovatnoća pojavljivanja veličine x_i. Kako su neodređenosti koordinate Δx i impulsa Δp_x definisane kao kvadratni koreni njihovih disperzija, tada iz (9.2.79) sledi:

$$\Delta x \Delta p_x \ge \frac{1}{2}\hbar. \tag{9.2.81}$$

Na analogni način može da se izvede relacija neodređenosti za opšti slučaj kada srednje vrednosti koordinate i impulsa nisu jednake nuli. Tada u integralu (9.2.73) treba da se x zameni sa $x - \langle x\rangle$, a $\partial\Psi/\partial x$ sa $\partial\Psi/\partial\, x - \langle p\rangle$.

9.3 ATOM I ZRAČENJE ENERGIJE

Gotovo sve bitne činjenice o energijskim nivoima atoma dobijaju se iz atomskog spektra koji i nastaje kao rezultat radijacionog prelaza atoma sa višeg na niži energijski nivo (emisija) ili sa nižeg na viši nivo (apsorpcija). Iako proučavanje zračenja atoma sa teorijske (i eksperimentalne) strane nije tema ove knjige, zbog suštinskog značaja koje proučavanje spektra ima u ispitivanju strukture atoma, u ovom poglavlju iznećemo, na elementarnom nivou, osnovne zakonitosti zračenja atoma. Krajnji cilj jeste dobijanje, teorijskim putem, merila, koja se nazivaju pravila izbora ili pravila prelaza, a koja govore o tome da li je ili nije u principu moguć radijacioni prelaz između dva nivoa energije.

DODATAK 9.3

Jednačine (D-4.6.20) ili (D-4.6.21) pokazuju da se kinetička, odnosno potencijalna energija harmonijskog oscilatora menjaju sa vremenom kao kvadrati sinusne ili kosinusne funkcije. U ovom poglavlju izvešćemo i neke druge izraze koji se menjaju sa vremenom na ovaj način. Izračunavanje srednje vrednosti ovakvih izraza podrazumeva nalaženje srednje vrednosti kvadrata sinusne odnosno kosinusne funkcije. Najpre ćemo izračunati njihove

srednje vrednosti u toku jednog perioda oscilovanja T, a zatim pokazati da se ista vrednost dobija za interval vremena t_1 koji je mnogo veći od perioda oscilovanja T. Prema definiciji srednje vrednosti za period T dobija se:

$$\langle \cos^2\omega t\rangle = \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} \cos^2\omega t \quad dt = \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} \frac{1+\cos 2\omega t}{2} dt =$$

$$= \frac{1}{2T}\, t\Big|_{-T/2}^{T/2} + \frac{1}{4\omega T}\sin 2\omega t\Big|_{-T/2}^{T/2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi}\sin 2\pi = \frac{1}{2} \tag{D-9.3.1}$$

pri čemu se uzima u obzir da je $\omega = 2\pi/T$. Na isti način, za srednju vrednost kvadrata sinusne funkcije dobija se:

$$\langle \sin^2\omega t\rangle = \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} \sin^2\omega t dt = \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} \frac{1-\cos 2\omega t}{2} dt =$$

$$= \frac{1}{2T} t\Big|_{-T/2}^{T/2} - \frac{1}{4\omega T}\sin 2\omega t\Big|_{-T/2}^{T/2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{4\pi}\sin 2\pi = \frac{1}{2}. \tag{D-9.3.2}$$

Srednja vrednost kosinusne funkcije u intervalu vremena $t_1 \gg T$ izračunava se kao:

$$\langle \cos^2\omega t\rangle = \frac{1}{t_1}\int_0^{t_1} \cos^2\omega t dt = \frac{1}{t_1}\int_0^{t_1} \frac{1+\cos 2\omega t}{2} dt =$$

$$= \frac{1}{2t_1} t\Big|_0^{t_1} + \frac{1}{4\omega t_1}\sin 2\omega t\Big|_0^{t_1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{4\omega t_1}\sin 2\omega t_1 = \frac{1}{2}. \tag{D-9.3.3}$$

Kako je $\omega t_1 = 2\pi t_1/T$ i pri $t_1 \gg T$, drugi član jednačine (D-9.3.3) teži nuli, pa se srednja vrednost kosinusne funkcije za interval vremena $t_1 \gg T$ svodi, takođe, na vrednost 1/2.

9.3.1 Klasična teorija zračenja

Prema klasičnoj elektromagnetnoj teoriji, elektromagnetno zračenje pobuđuje se oscilovanjem električnog dipola. U Dodatku D-6.3.1 definisan je pojam električnog dipola i analizirana je polarizovanost zračenja koje nastaje oscilovanjem dipola. Dipol (Hercov dipol) je sistem koji čine dva naelektrisanja jednaka po količini, a suprotna po znaku, koja se, u određenom trenutku vremena, nalaze na međusobnom rastojanju r. Pomeranjem napred-nazad, duž linije koja ih spaja, pozitivno i negativno naelektrisanje osciluju. Pri njihovom oscilovanju dužina r menja se sa vremenom. Ako naelektrisanja imaju jednake mase, tada su i njihovi pomeraji pri oscilovanju jednaki, ali su suprotnog smera. Kada jedno od naelektrisanja (npr. pozitivno) ima mnogo veću masu od mase drugog naelektrisanja, oscilovanje dipola može da se posmatra kao oscilovanje naelektrisanja male mase u odnosu na drugo naelektrisanje, koje se zbog velike mase smatra nepokretnim. Ovo se sreće kod

atoma gde se jezgro (zbog znatno veće mase od mase elektrona) smatra nepokretnim, pa elektromagnetno polje nastaje oscilovanjem elektrona. Električne osobine dipola karakterišu se veličinom koja se naziva dipolni moment $\vec{\mu}$:

$$\vec{\mu} = q\vec{r} \tag{9.3.1}$$

gde je $\vec{r}$ radijus vektor upravljen od negativnog ka pozitivnom naelektrisanju. Kako dipolni moment ne zavisi od izbora koordinatnog početka, najzgodnije je da se koordinatni početak veže za pozitivno naelektrisanje. Tada su komponente vektora $\vec{\mu}$:

$$\mu_x = qx; \quad \mu_y = qy; \quad \mu_z = q_z$$

pri čemu je q naelektrisanje dipola. Pri oscilovanju $\vec{r}$ se menja sa vremenom, pa kada je reč o prostom harmonijskom kretanju dipolni moment $\vec{\mu}$ može da se napiše u obliku:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_0 e^{i\omega t} \tag{9.3.1a}$$

gde je ω ugaona frekvencija, a t vreme. Elektromagnetno polje dipola koji osciluje prikazaćemo, ne ulazeći u izvođenje, pomoću Maksvelovih jednačina. Posmatraćemo, dakle, dipol sa naelektrisanjem q (u najvećem broju slučajeva to je elektron, pa je q=-e) koji osciluje duž z-ose sa nekom frekvencijom v. Nastalo elektromagnetno polje, na dovoljno velikoj udaljenosti od dipola (u talasnoj zoni) okarakterisano je jačinama električnog polja $\vec{\varepsilon}$ i magnetnog polja $\vec{H}$, čiji su vektori normalni jedan na drugi. Veza između intenziteta vektora jačine električnog polja $\vec{\varepsilon}$ i magnetnog polja $\vec{\mathrm{H}}$, u SI sistemu jedinica data je odnosom:

$$|\vec{H}| = \frac{1}{c}\,|\vec{\varepsilon}|\,.$$

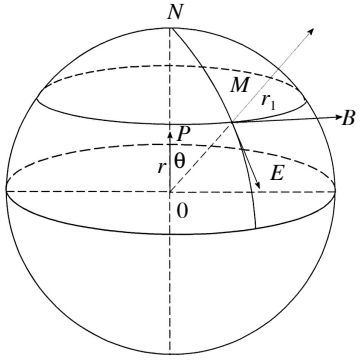
Intenzitet jačine električnog polja $|\vec{\varepsilon}|$ u tački M, definisanoj u sfernom koordinatnom sistemu radijus vektorom $\vec{r}_1$ [17] (sa početkom u tački O) i uglovima θ i φ, u trenutku t, Slika 9.3.1, prikazan je jednačinom:

$$|\vec{\xi}| = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\left|\ddot{\vec{\mu}}\left(t-\frac{r_1}{c}\right)\right|}{c^2 r_1}\sin\theta \tag{9.3.2}$$

gde je c brzina svetlosti u vakuumu, θ ugao između prave duž koje osciluju dipol i one koja spaja tačku M i tačku O. Sa $\ddot{\vec{\mu}}$ se označava drugi izvod dipolnog momenta po vremenu koji kada se uzme u obzir (9.3.1) dobija oblik:

[17] Sa $\vec{r}_1$ označava se radijus vektor tačke M, umesto uobičajenog $\vec{r}$ da se ne bi u posmatranom slučaju izveo (pogrešan) zaključak da naelektrisanja dipola osciluju duž radijus vektora tačke M.

$$\ddot{\vec{\mu}} = q\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}.$$



Slika 9.3.1 Zračenje dipola. Nastalo elektromagnetno polje u tački *M* može da se prikaže vektorima električnog i magnetnog polja. Vektor jačine električnog polja ima pravac tangente na meridijan u tački *M*, a vektor jačine magnetnog polja ima pravac tangente na paralelu, takođe u tački *M*.

Izraz $t - r_1/c$ u zagradi $\ddot{\vec{\mu}}$ pokazuje da se drugi izvod dipolnog momenta (ubrzanje dipola) odnosi na trenutak vremena $t\text{-}r_1/c$. Očigledno je da je r_1/c vreme koje je potrebno da se proces koji se prostire brzinom c, prenese od tačke O (oko koje osciluje naelektrisanje q), do tačke M u kojoj određujemo jačinu električnog polja, dakle da pređe rastojanje r_1. Prema tome, elektromagnetno polje nastalo oscilovanjem dipola, ima konačnu brzinu prostiranja c. Pravci $\vec{\xi}$ i $\vec{H}$ određuju se na sledeći način. Oko tačke O opisana je zamišljena sfera sa poluprečnikom r_1. Za polarnu osu uzima se osa duž koje dipol osciluje (osa z). Vektor $\vec{\xi}$ upravljen je duž tangente na meridijan koji prolazi kroz tačku M, a vektor $\vec{H}$ ima pravac tangente na paralelu koja, takođe, prolazi kroz tačku M. Električno polje je obrnuto srazmerno rastojanju r_1, a upravo srazmerno ubrzanju koje je naelektrisanje dipola imalo u nekom prošlom trenutku vremena $t\text{-}r_1/c$. Gustina energije električnog i magnetnog polja (energija po jedinici zapremine) u je:

$$u = \frac{\varepsilon_0}{2}\vec{\xi}\cdot\vec{\xi} + \frac{\varepsilon_0 c^2}{2}\vec{H}\cdot\vec{H} \tag{9.3.3}$$

ili ako se uzme da je veza između intenziteta vektora magnetnog i električnog polja $|\vec{H}| = |\vec{\xi}|/c$:

$$u = \varepsilon_0\xi^2 \left[\frac{J}{m^3}\right] \tag{9.3.4}$$

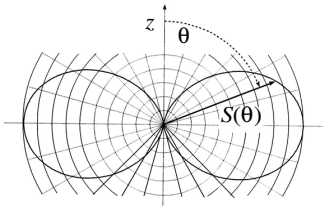
ε_0 je električna propustljivost vakuuma. Kako se polje oscilujućeg dipola prostire brzinom c, kroz jedinicu površine u jednoj sekundi na rastojanju r_1 protiče energija S:

$$S = u\cdot c = \varepsilon_0 c\xi^2 \left[\frac{J}{m^3 s}\right]$$

ili:

$$S = \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\ddot{\vec{\mu}}}{c^2 r_1}\sin\theta\right)^2 \cdot \varepsilon_0 c = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{4\pi c^3 r_1^2}(\ddot{\vec{\mu}})^2\sin^2\theta. \tag{9.3.5}$$

Iz jednačine (9.3.5) vidi se da energija zračenja raste s kvadratom ubrzanja, a obrnuto je srazmerna kvadratu rastojanja r_1, iz čega sledi da je ukupni protok energije kroz sferu oko tačke *O* stalan (površina sfere raste srazmerno sa r_1^2). Zbog faktora $\sin^2\theta$, u jednačini (9.3.5), protok energije različit je u različitim pravcima. Na Slici 9.3.2 prikazana je zavisnost funkcije *S* od ugla θ u obliku polarnog dijagrama.



Slika 9.3.2 Polarni dijagram zavisnosti protoka energije *S* od ugla θ.

U pravcu u kojem dipol osciluje, protok energije S jednak je nuli ($\theta = 0$), dok je vrednost protoka energije najveća u pravcu koji je normalan na pravac oscilovanja dipola.

Jednačina (9.3.5) predstavlja izraz za protok energije koja u datom trenutku prolazi kroz određenu tačku u prostoru, u pravcu koji je definisan uglom θ. Ukupna energija koju u jedinici vremena zrači oscilator, dobija se izračunavanjem integrala:

$$E = \int S \, d\sigma \tag{9.3.6}$$

gde je $d\theta$ element površine koji u sfernim koordinatama iznosi:

$$d\sigma = r_1^2 \sin\theta \, d\varphi \, d\theta \,. \tag{9.3.7}$$

Kada se $d\theta$ zameni u (9.3.6) dobija se:

$$E = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{4\pi c^3 r_1^2} r_1^2 (\ddot{\mu})^2 \sin^2\theta \sin\theta d\theta d\varphi =$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{4\pi c^3}(\ddot{\mu})^2 \int_0^{\pi} \sin^3\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2\pi}{4\pi c^3}(\ddot{\mu})^2 \int_0^{\pi} \sin^3\theta \, d\theta \,.$$

Integral $\int_0^{\pi} \sin^3\theta \, d\theta$ može da se napiše u obliku:

$$\int_0^{\pi} \sin^2\theta \sin\theta \, d\theta = \int_0^{\pi} (1 - \cos^2\theta) \cdot \sin\theta \, d\theta \,.$$

Uvođenjem smene $t=\cos\theta$, uz $dt=-\sin\theta \, d\theta$, određuje se vrednost ovog integrala:

$$\int_{+1}^{-1} (1 - t^2) \cdot (-dt) = -t + \frac{t^3}{3}\Big|_1^{-1} = \frac{4}{3}$$

pa je ukupna energija izračena u sekundi:

$$E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2}{3c^3}(\ddot{\vec{\mu}})^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2}{3c^3}q^2(\ddot{\vec{r}})^2 . \tag{9.3.8}$$

Dobijena jednačina izražava veličinu ukupne energije koja se izrači u jedinici vremena. Kako se drugi izvod dipolnog momenta menja periodično s vremenom, menja se i ukupna izračena energija E. Praktični značaj ima srednja, a ne trenutna energija, jer su zbog velike učestanosti svetlosti (za vidljivi deo spektra ona iznosi $\nu \sim 10^{15}\ s^{-1}$) svi uređaji osetljivi na srednju energiju. Izračunaćemo zato, za dovoljno veliki interval, npr. za jednu sekundu, srednju emitovanu energiju $\langle E\rangle$. Ona je, kako je pokazano u Dodatku, jednaka srednjoj energiji za period T:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2}{3c^3}\langle(\ddot{\vec{\mu}})^2\rangle \tag{9.3.9}$$

pri čemu je sada $\langle\ddot{\vec{\mu}}^2\rangle$ srednja vrednost kvadrata drugog izvoda dipolnog momenta po vremenu. Kada se dipolni moment menja s vremenom po zakonu harmonijskih oscilacija, jednačina (9.3.1a) pri čemu uzimamo *realni* deo kompleksnog izraza $e^{i\omega t}$, $\mu=\mu_0 \cos \omega t = \mu \cos 2\pi\nu t$, sa kružnom frekvencijom ω odnosno linearnom ν, tada je drugi izvod dipolnog momenta: $\ddot{\mu} = -4\pi^2\nu^2 \mu_0 \cos 2\pi\nu t$, pa se zamenjivanjem u (9.3.9) dobija:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{32\pi^4\nu^4}{3c^3}\mu_0^2\langle\cos^2 2\pi\nu t\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2\omega^4}{3c^3}\mu_0^2\langle\cos^2\omega t\rangle \ (\omega = 2\pi\nu) .$$

Uzimajući da je $\langle\cos^2\omega t\rangle = \langle\cos^2 2\pi\nu t\rangle = 1/2$ dobija se:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\omega^4}{3c^3}\mu_0^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{16\pi^4\nu^4}{3c^3}\mu_0^2 . \tag{9.3.10}$$

Neka pozitivno naelektrisanje miruje u koordinatnom početku (tačka O, Slika 9.3.1), a negativno naelektrisanje osciluje duž z-ose. Tada je $\mu = qz$, a srednja energija zračenja prema jednačini (9.3.9) prikazuje se u obliku:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2}{3}\frac{q^2}{c^3}\langle\ddot{z}^2\rangle . \tag{9.3.11}$$

Ako su oscilacije harmonijske, tada je: $z = z_0 \cos \omega t = z_0 \cos 2\pi\nu t$, a odgovarajući kvadrat drugog izvoda dipolnog momenta po vremenu: $\ddot{z}^2 = (-4\pi^2\nu^2)^2 z_0^2 \cos^2 2\pi\nu t$, dok je srednja vrednost $\langle\ddot{z}^2\rangle = 8\pi^4\nu^4 z_0^2$, pa se zamenjivanjem u (9.3.11) dobija:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2\omega^4}{3c^3} z_0^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{16\pi^4 q^2\nu^4}{3c^3} z_0^2 . \tag{9.3.12}$$

Prema tome, jednačina (9.3.12) daje srednju energiju koja se emituje kada naelektrisanje q osciluje sa frekvencijom ν, pri čemu je maksimalna amplituda oscilovanja z_0.

9.3.2 Verovatnoće optičkih kvantnih prelaza

Vratićemo se sada na kvantno tumačenje emisije odnosno apsorpcije energije. Atomi, kao što je već rečeno, mogu imati određene (diskretne) vrednosti energije, pa kažemo da se nalaze u kvantnim stanjima koja su kvantovana brojevima (*kvantnim* brojevima). Apsorpcija odnosno emisija kvanata energije (to su tzv. radijativni procesi), posledica je promene kvantnog stanja atoma. Promena kvantnog stanja atoma može da se dogodi spontano ili prinudno, pod dejstvom nekog spoljašnjeg uticaja. Neka se N_n atoma nalazi u pobuđenom energijskom stanju n, E_n. U stanje m, koje ima nižu energiju E_m, pobuđeni atomi mogu da pređu spontano, pri čemu se emituje kvant energije hv koji je jednak razlici energija stanja n i m ($hv = E_n - E_m$), Slika 9.3.3. Proces emisije fotona je statističke prirode, što znači da je nemoguće predvideti koji će atom u kojem trenutku da pređe u niže kvantno stanje. Može da se definiše samo verovatnoća spontane emisije A_{nm} (ima dimenzije recipročne vremenu). Ako se pretpostavi da se u višem kvantnom stanju n nalazi N_n atoma, tada je emitovana energija po sekundi (broj emitovanih kvanata frekvencije v) jednaka proizvodu broja atoma u višem kvantnom stanju n, verovatnoće prelaza A_{nm}, energije kvanta hv i statističke težine kvantnog stanja g_n[18]:

$$E_{em} = A_{nm} N_n g_n h\nu : \tag{9.3.13}$$

Apsorpcija kvanata energije hv događa se prinudno, pod uticajem polja zračenja određene gustine u_v oko frekvencije v ($J \cdot s/m^3$). U prisustvu takvog polja atomi, uzimajući od polja energiju $hv = E_n - E_m$, prelaze iz nižeg kvantnog stanja m u više kvantno stanje n. Apsorbovana energija u sekundi jednaka je proizvodu broja atoma u nižem kvantnom stanju, spektralne gustine enrgije u_v, verovatnoće prelaza B_{mn}, statističke težine nivoa m, g_m i energije kvanta hv:

$$E_{aps} = u_v B_{mn} N_m g_m h\nu . \tag{9.3.14}$$

Stimulisana emisija je proces u potpunosti obrnut (inverzan) apsorpciji. Za razliku od spontane emisije, stimulisana emisija je prinudni proces i javlja se kada se pobuđeni atomi nađu u nekom polju zračenja. Pod uticajem tog polja pobuđeni atomi prelaze u niže kvantno stanje uz emisiju kvanata energije $hv = E_n - E_m$, koji se emituju u određenom pravcu. Emitovana energija u sekundi jednaka je proizvodu broja atoma u pobuđenom stanju, spektralne gustine energije u_v, verovatnoće prelaza B_{nm}, statističke težine nivoa n, g_n:

$$E_{em} = u_v B_{nm} N_n g_n h\nu . \tag{9.3.15}$$

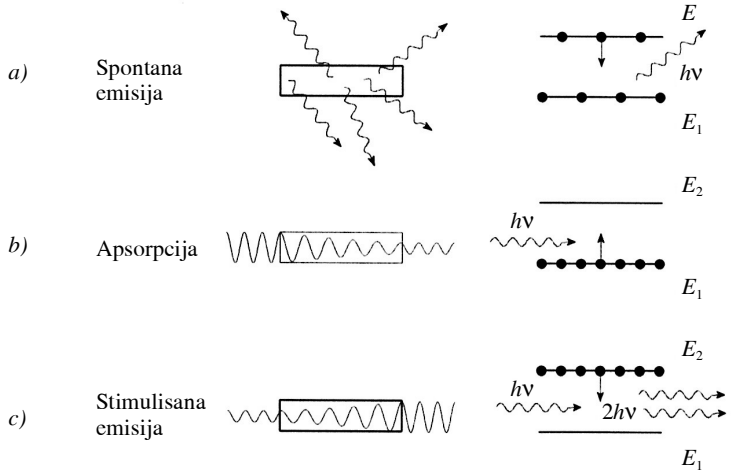
Vezu između koeficijenata A_{nm} i B_{nm} izveo je Ajnštajn i ona može da se dobije čisto statističkim razmatranjem. Polazi se od toga da je:

[18] Statistička težina nivoa jednaka je broju stanja sa istom energijom (degeneracija stanja). Statistička težina elektronskog nivoa sa orbitnim kvantnim brojem L i spinskim S je: $g = (2L + 1) \cdot (2S + 1)$.

a) relativni broj atoma u nivoima n i m, N_n i N_m, pri termodinamičkoj ravnoteži, određen Bolcmanovim zakonom raspodele čestica po energijama:

$$N_n = g_n e^{\frac{-E_n}{kT}} i \qquad N_m = g_m e^{\frac{-E_m}{kT}} \tag{9.3.16}$$

g_n i g_m su statističke težine nivoa n i m; E_n i E_m su energije nivoa, k je Bolcmanova konstanta ($k=R/N=1{,}38\text{x}10^{-23}$ *J/K, R* je univerzalna gasna konstanta, a N – Avogadrov broj).



Slika 9.3.3 Atom i promena energije: a) spontana emisija: atom iz pobuđenog stanja n, bez spoljnjeg uticaja, spontano prelazi u kvantno stanje m koje ima nižu energiju, uz emisiju kvanta energije hv koji se emituje u proizvoljnom pravcu; b) apsorpcija: atom apsorbuje kvant energije hv i pri tome prelazi iz kvantnog stanja niže energije u kvantno stanje više energije; c) stimulisana energija: atom u pobuđenom stanju, pod dejstvom upadnog kvanta energije hv, prelazi u niže kvantno stanje uz emisiju kvanta energije hv, koji se emituje u pravcu upadnog kvanta.

i da je;

b) kod termodinamičke ravnoteže u gasu, gustina zračenja u_v, data je Plankovom jednačinom:

$$u_v = \frac{8\pi h v^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1}. \tag{9.3.17}$$

Dalje, u stanju statističke ravnoteže, brzina svakog elementarnog procesa jednaka je brzini njemu obrnutog procesa. Tako se pri spontanoj i stimulisanoj emisiji, smanjuje broj atoma u pobuđenom stanju n i to brzinom υ_{em} koja je jednaka smanjenju broja atoma (u kvantnom stanju n) u jedinici vremena, $-dN_n/dt$:

$$-\frac{dN_n}{dt} = \upsilon_{em} = B_{nm} N_n u_v + A_{nm} N_n. \tag{9.3.18}$$

Znak „-" u jednačini (9.3.18) znači da broj atoma u nivou *n*, opada. Obrnuti proces, proces apsorpcije, dovodi do povećanja broja atoma u nivou *n* i to brzinom υ_{aps} koja je jednaka povećanju broja atoma (u kvantnom stanju *n*) u jedinici vremena, *dNn/dt:*

$$\frac{dN_n}{dt} = \upsilon_{aps} = B_{mn}u_\nu N_m . \tag{9.3.19}$$

Kako je u stanju ravnoteže $\upsilon_{em} = \upsilon_{aps}$, sledi:

$$B_{nm}N_n u_\nu + A_{nm}N_n = B_{mn}u_\nu N_m . \tag{9.3.20}$$

Takođe, važi:

$$g_m B_{mn} = g_n B_{nm} . \tag{9.3.21}$$

Zamenjivanjem jednačina (9.3.21) i (9.3.17) u (9.3.20) i uz korišćenje (9.3.16) dobija se:

$$A_{nm} = \frac{N_m}{N_n}B_{mn}u_\nu - B_{nm}u_\nu = u_\nu\left[\frac{g_m}{g_n}B_{mn}e^{\frac{h\nu}{kT}} - \frac{g_m}{g_n}B_{mn}\right]$$

pa iz prethodne relacije sledi veza između Ajnštajnovih koeficijenata za spontanu emisiju A_{nm} i za apsorpciju B_{mn}:

$$g_n \cdot A_{nm} = g_m \cdot B_{mn} \cdot \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} . \tag{9.3.22}$$

9.3.3 Kvantnomehanička slika zračenja – dipolni moment prelaza

Protumačićemo sada proces apsorpcije i emisije zračenja sa stanovišta kvantne mehanike. Videli smo ranije, da je prema zakonima klasične elektrodinamike, energija E koja se izrači po jedinici vremena, jednačine (9.3.8), (9.3.9):

$$E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2}{3c^3}(\ddot{\vec{\mu}})^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2}{3c^3}\left(\frac{d^2\vec{\mu}}{dt^2}\right)^2 . \tag{9.3.23}$$

Prema principu korespondencije, veza između energije koja se emituje i, uslovno rečeno, dipolnog momenta atoma u kvantnoj mehanici, istog je oblika kao i veza u klasičnoj elektrodinamici. To znači da treba da za dipolni moment u kvantnoj mehanici potražimo izraz analogan izrazu u klasičnoj mehanici. Imajući na umu definiciju dipolnog momenta [relacija (9.3.1)] napisaćemo kvantnomehanički izraz za srednju ili očekivanu vrednost, npr. koordinate $\vec{r}$ [videti (8.4.30)]:

$$\langle \vec{r} \rangle = \int \Psi_n^* \vec{r} \Psi_n dV \tag{9.3.24}$$

pri čemu je Ψ talasna funkcija, a Ψ^* njoj konjugovana funkcija. Proizvod talasnih funkcija $\Psi \cdot \Psi^*$ prema Bornovom tumačenju predstavlja gustinu verovatnoće, pa

je jednačina (9.3.24) uobičajeni izraz za srednju vrednost prema teoriji verovatnoće. Uzimajući u obzir (9.3.24) i (9.3.1) dobijamo kvantnomehaničku definiciju dipolnog momenta $\vec{\mu}$:

$$\vec{\mu}_n = -e \cdot \langle \vec{r} \rangle = -e \cdot \int \Psi_n^* \vec{r} \Psi_n dV \tag{9.3.25}$$

pri čemu je $-e$ naelektrisanje elektrona a n u indeksu talasne funkcije Ψ govori da je reč o talasnoj funkciji n-tog kvantnog odnosno stacionarnog stanja atoma. Funkcija Ψ iz jednačine (9.3.25) zavisi i od koordinata i od vremena, pa može da se napiše kao proizvod funkcije ψ koja zavisi samo od koordinata i jedne eksponencijalne funkcije kojom se izražava vremenska zavisnost [videti (8.4.15)]:

$$\Psi_n(x, y, z, t) = e^{\frac{-i}{\hbar}E_n t} \psi_n(x, y, z) \tag{9.3.26}$$

pri čemu je E_n energija stanja, a t je vreme. Kako funkcija koja je konjugovano kompleksna funkciji (9.3.26) ima promenjeni znak u članu koji prikazuje vremensku zavisnost, iz jednačine (9.3.25) sledi da je dipolni moment atoma koji se nalazi u nekom od svojih stacionarnih stanja stalan, odnosno nula (videti poglavlje 9.1) i ne zavisi od vremena. Kada atom prelazi iz kvantnog stanja n u kvantno stanje m (neka je stanje n stanje veće energije), dolazi, prema Borovom uslovu frekvencije, do emisije kvanta energije $h\nu$ $(=E_n-E_m)$. Prema Dirakovoj teoriji, energija koju atom emituje određena je dipolnim momentom prelaza $\vec{\mu}_{nm}$ koji zavisi od talasnih funkcija Ψ_n (gornjeg stanja označenog kvantnim brojem n) i od konjugovano kompleksne funkcije Ψ_{m^*} (donjeg stanja sa kvantnim brojem m), pri čemu nije bitno koja se od funkcija Ψ_n ili Ψ_m uzima kao konjugovano kompleksna jer je operator r ermitski:

$$\vec{\mu}_{nm} = -e \cdot \int \Psi_m^* \vec{r} \Psi_n dV = -e \cdot e^{\frac{-i}{\hbar}(E_n - E_m)t} \cdot \int \psi_m^* \vec{r} \psi_n dV \tag{9.3.27}$$

gde je:

$$\Psi_n = e^{\frac{-i}{\hbar}E_n t} \psi_n(x, y, z) \qquad \Psi_m = e^{\frac{-i}{\hbar}E_m t} \psi_m(x, y, z). \tag{9.3.28}$$

Veličina:

$$\vec{p}_{nm} = \int \psi_m^* \vec{r} \psi_n dV \tag{9.3.29}$$

zavisi samo od koordinata i predstavlja vektor s komponentama:

$$p_{nm}^x = \int \psi_m^* x \psi_n dV; \quad p_{nm}^y = \int \psi_m^* y \psi_n dV; \quad p_{nm}^z = \int \psi_m^* z \psi_n dV. \tag{9.3.30}$$

U jednačinu (9.3.23) uvrštava se $\left(2\frac{d^2\vec{\mu}_{nm}}{dt^2}\right)^2$ ili četvorostruki kvadrat drugog izvoda momenta prelaza po vremenu, umesto kvadrata drugog izvoda klasičnog dipolnog momenta po vremenu. Ovo se čini jer se stožim izvođenjem pokazuje da je kvantnomehanički dipolni moment dva puta manji od klasičnog, pa se korišćenjem (9.3.23) dobijaju iste vrednosti izračenih energija kada se uzme u obzir takav odnos veličina klasičnog i kvantnog dipola. Pre toga, izračunava se drugi izvod momenta prelaza po vremenu korišćenjem jednačine (9.3.27). Prvo ćemo napisati prvi izvod dipolnog momenta prelaza po vremenu:

$$\frac{d\vec{\mu}_{nm}}{dt} = e\cdot\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)e^{\frac{-i}{\hbar}(E_n-E_m)t}\cdot\int\psi_m^*\,\vec{r}\psi_n dV \tag{9.3.31}$$

pa je drugi izvod momenta prelaza jednak:

$$\frac{d^2\vec{\mu}_{nm}}{dt^2} = e\cdot\frac{1}{\hbar^2}(E_n - E_m)^2 e^{\frac{-i}{\hbar}(E_n-E_m)t}\cdot\int\psi_m^*\,\vec{r}\psi_n dV\,. \tag{9.3.32}$$

U izrazu za drugi izvod momenta prelaza, E_n-E_m zamenićemo sa $h\nu$, dok se kompleksni izraz $e^{-2\pi i\nu t}$ (dobijen u ovom obliku posle uvođenja $h\nu$) svodi se na njegov realni deo, imajući na umu da se samo realni deo kompleksnog broja može povezati s realnim fizičkim veličinama. Uz ove izmene izraz (9.3.32) dobija oblik:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\vec{\mu}_{nm}}{dt^2} &= 4e\pi^2\nu^2 e^{-2\pi i\nu t}\cdot\int\psi_m^*\,\vec{r}\psi_n dV \quad\Rightarrow\\ \frac{d^2\vec{\mu}_{nm}}{dt^2} &= 4e\pi^2\nu^2\cos((2\pi i\nu t)\cdot\int\psi_m^*\,\vec{r}\psi_n dV)\,.\end{aligned} \tag{9.3.33}$$

Odredićemo, zatim, kvadrat relacije (9.3.33) i izračunati njegovu srednju vrednost za interval vremena t koji je dovoljno veliki u odnosu na period oscilovanja T, a koji se svodi na izračunavanje srednje vrednosti kvadrata kosinusne funkcije, što iznosi (kako je pokazano u Dodatku)1/2:

$$\left(\frac{d^2\vec{\mu}_{nm}}{dt^2}\right)^2 = 16e^2\pi^4\nu^4\langle\cos^2(2\pi i\nu t)\rangle\cdot\left|\int\psi_m^*\,\vec{r}\psi_n dV\right|^2 = \tag{9.3.34}$$

$$= 8e^2\pi^4\nu^4\cdot\left|\int\psi_m^*\,\vec{r}\psi_n dV\right|^2. \tag{9.3.35}$$

Uzimajući u obzir već pomenuti faktor 2, koji podignut na kvadrat daje 4, kojim se zatim izraz (9.3.35) množi i takav zamenjuje u jednačinu za srednju energiju (9.3.23), dobija se:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{64\pi^4\nu^4}{3c^3}\left|\int \psi_m^*\vec{\mu}\psi_n dV\right|^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{64\pi^4 e^2\nu^4}{3c^3}|\vec{p}_{nm}|^2. \qquad (9.3.36)$$

Upoređivanjem jednačine (9.3.36) s jednačinom (9.3.10) ili (9.3.12) i uzimajući da emitovane energije „klasičnog" i „kvantnog" dipola treba da budu iste, zaista se dobija da klasični dipolni moment $\vec{\mu}$ i moment prelaza $\vec{p}_{nm}$ stoje u vezi:

$$|\vec{\mu}|^2 = |2e\vec{p}_{nm}|^2. \qquad (9.3.37)$$

Izraz (9.3.36) definiše srednju energiju jednog dipola koja, u skladu sa jednačinom (9.3.13), može da se napiše kao:

$$\langle E\rangle = A_{nm}\cdot h\nu \qquad (9.3.38)$$

gde je A_{nm} verovatnoća prelaza koja je na osnovu (9.3.38) jednaka:

$$A_{nm} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{64\pi^4 e^2\,\nu^3}{3hc^3}\left|\int \psi^*{}_m\vec{r}\psi_n dV\right|^2. \qquad (9.3.39)$$

Recipročna vrednost $1/A_{nm}$ ima dimenzije vremena i jednaka je srednjem vremenu života τ pobuđenog stanja kada je prelaz u donje stanje m jedino moguć (videti i poglavlje 8.3). Kada je stanje m i osnovno stanje, ovo vreme određuje, prema Hajzenbergovoj relaciji neodređenosti, prirodnu širinu pobuđenog energijskog stanja, odnosno prirodnu širinu spektralnih linija emitovanog zračenja. Obično su mogući (radijativni) prelazi na različita stanja sa određenom verovatnoćom za svaki, pa se definiše zbir ΣA_{nm} (sumira se po m) i tada je srednje vreme života recipročna vrednost ovoga zbira. Na osnovu jednačine (9.3.39) sledi da verovatnoće prelaza mogu da se izračunaju kada su poznate talasne funkcije stanja atoma između kojih se vrši prelaz. Verovatnoće prelaza mogu da se odrede i eksperimentalno. Tada se obično određuje efektivno vreme života τ_{ef} koje je povezano sa svim procesima (ne samo radijativnim) koji dovode do smanjenja broja atoma u pobuđenom stanju.

9.3.4 Pravila izbora

Pravila izbora pokazuju to da li je određeni kvantni prelaz $n \to m$ dozvoljen ili nije. Kada je moment prelaza:

$$\vec{p}_{nm} = \int \psi_m\vec{r}\psi^*{}_n dV$$

različit od nule, prelaz je dozvoljen, a kada je moment prelaza jednak nuli, prelaz je zabranjen. Kako je veličina $\vec{p}_{nm}$, vektor sa komponentama u pravcu tri koordinatne ose x, y i z, može da se dogodi da neke od komponenti vektora momenta prelaza budu jednake nuli, a da su druge različite od nule. Npr. komponente vektora $\vec{p}_{nm}$ u pravcu x i y ose mogu da budu nula, dok je komponenta $\vec{p}_{nm}$ u pravcu z ose različita od nule. Tada se kaže da je emitovano zračenje polarizovano u pravcu z ose. Dakle, pravila izbora utvrđuju se izračunavanjem x, y i z komponente vektora momenta prelaza $\vec{p}_{nm}$. Na primeru vodonikovog atoma, čije su talasne funkcije poznate, može

da se pokaže ovaj postupak. Koristimo sferni koordinatni sistem ($x = r\cos\varphi\sin\theta$; $y = r\sin\varphi\sin\theta$; $z = r\cos\theta$), pri čemu je element zapremine $dV = r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$. Neka atom prelazi iz kvantnog stanja *n'l'm'*u kvantno stanje *n l m* (*n'l'm'* $\rightarrow$ *nlm*), gde sa *n* označavamo glavni kvantni broj, *l* orbitni, a *m* magnetni kvantni broj. Oznaka '(prim) odnosi se na gornje kvantno stanje. Komponente momenta prelaza u sfernim koordinatama date su kao:

$$\begin{aligned} p_x &= \int \psi^*_{n'} x \psi_n dV = \int \psi^*_{n'} r\sin\theta\cos\varphi\psi_n dV; \\ p_y &= \int \psi^*_{n'} y \psi_n dV = \int \psi^*_{n'} r\sin\theta\sin\varphi\psi_n dV; \\ p_z &= \int \psi^*_{n'} z \psi_n dV = \int \psi^*_{n'} r\cos\theta\psi_n dV\,. \end{aligned} \tag{9.3.40}$$

Ranije je pokazano (poglavlje 9.1) da se za atom vodonika funkcija ψ predstavlja kao proizvod 3 funkcije od kojih svaka zavisi samo od jedne promenljive *r*, θ ili φ:

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)\cdot\Theta_{\Delta l,m}(\theta)\cdot\Phi_m(\varphi)\,. \tag{9.3.41}$$

Indeksi kod ψ, Θ i Φ su celi brojevi i odgovaraju, kako je ranije pokazano, glavnom kvantnom broju *n*, orbitnom kvantnom broju *l* i magnetnom kvantnom broju *m*.

Za *z*-komponentu momenta prelaza, p_z može da se napiše:

$$\begin{aligned} p_z &= \int_0^\infty \psi^*_{n'} r\cos\theta\psi_n dV = \int_0^\infty R_{n'l'}(r) r R_{nl} r^2 dr \cdot \\ &\cdot \int_0^\pi \Theta_{l'm'}(\theta)\cos\theta\Theta_{lm}(\theta)\sin\theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} \Phi^*_{m'}(\varphi)\cdot\Phi_m(\varphi) d\varphi\,. \end{aligned} \tag{9.3.42}$$

Prvi integral u jednačini (9.3.42), označićemo sa 1, drugi sa 2 i treći sa 3. Da bi izraz (9.3.42) bio različit od nule, sva tri integrala moraju da budu različita od nule. Najpre ćemo izračunati vrednost integrala 3 jer je to i najjednostavnije. Kao što od ranije znamo, funkcija Φ_m ima oblik $\exp(im\varphi)$, pa se lako pokazuje da je integral:

$$\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}\cdot e^{im'\varphi} d\varphi = \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)} d\varphi$$

uvek jednak nuli, izuzev za *m'* = *m*. Integral 1, u opštem slučaju, različit je od nule za bilo koje vrednosti *n* i *l*. Dalje, može da se pokaže, što ovde ne izvodimo, da je integral 2 u izrazu (9.3.42) različit od nule samo kada je *l'*=*l*+1 i *l'*=*l*-1. Pravilo

$$\Delta l = l' - l = \pm 1$$

odražava zakon o održanju ugaonog momenta pri emisiji fotona, o čemu je detaljnije bilo reči u Dodatku D-6.3.2.

Analiziraćemo sada *x*-komponentu momenta prelaza i napisati je u obliku:

$$p_x = \int \psi^*_{n'} r \sin\theta \cdot \cos\varphi \psi_n dV = \int_0^\infty R_{n'l'}(r) r \cdot R_{nl}(r) r^2 dr \cdot \tag{9.3.43}$$

$$\cdot \int_0^\pi \Theta_{l'm'}(\theta) \sin\theta \Theta_{lm}(\theta) \sin\theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} \Phi_{m'}(\varphi) \cdot \cos\varphi \Phi_m(\varphi) d\varphi .$$

U trećem integralu u izrazu (9.3.43) javlja se cos φ koji ćemo izraziti kao:

$$\cos\varphi = \frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})$$

pa treći integral iz izraza (9.3.43) ima oblik:

$$\frac{1}{2}\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \cdot (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) e^{im'\varphi} d\varphi =$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} e^{i(m'+1-m)\varphi} d\varphi + \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} e^{i(m-1-m)\varphi} d\varphi .$$

Ovi integrali različiti su od nule samo za $m' = m - 1$ i $m' = m + 1$. Drugi integral u izrazu (9.3.43) različit je od nule, takođe, za $l' = l \pm 1$, dok je prvi integral različit od nule za svaku kombinaciju brojeva *n* i *l*. Slično može da se dobije i za *y*-komponentu momenta p_y. Prema tome, opšte pravilo izbora za magnetni kvantni broj jeste $\Delta m = 0, \pm 1$.

Ovakva analiza pokazuje to da je zračenje koje nastaje prelazom atoma s višeg kvantnog stanja na niže (u magnetnom polju) polarizovano u pravcu *z*-ose, kada je $\Delta m = 0$, jer je tada $p_z \neq 0$, dok su $p_x = p_y = 0$. S druge strane, zračenje koje nastaje prelazom atoma s višeg na niži nivo, pri čemu se magnetni kvantni broj *m* menja za +1 ili za -1, $\Delta m = \pm 1$, polarizovano je u *xy* ravni. Ovi zaključci, koji proizlaze iz čisto teorijskih razmatranja, mogu da se provere eksperimentalno, posmatranjem zračenja atoma u magnetnom polju. Ovo je tzv. Zemanov efekt (o kojem je ranije bilo govora) i kojim se pokazuje da je zračenje koje nastaje pri $\Delta m = 0$, polarizovano u pravcu *z*--ose (pravac magnetnog polja obično ima pravac *z*-ose), a da je za $\Delta m = \pm 1$ zračenje polarizovano u *xy* ravni – oscilacije električnog vektora vrše se u *xy* ravni, a ona je normalna na pravac magnetnog polja.

Pravila izbora (selekcije) pokazuju to da orbitni kvantni broj elektrona *l* ili ukupni kvantni broj atoma *L* mogu da se menjaju za jedinicu, $\Delta l = \pm 1$, $\Delta L = \pm 1$.

Pravilo $\Delta l = \pm 1$ postaje očigledno ako se zna da se, pri prelazu atoma iz jednog stanja u drugo, emituje foton čiji je spinski kvantni broj 1. Takođe, važi $\Delta J = 0, \pm 1$, gde je *J* kvantni broj koji kvantuje ukupni ugaoni moment (videti deo 5.4.3), a spinski kvantni broj pokorava se pravilu $\Delta S = 0$. Prema tome, po pravilu, zabranjene su kombinacije između termova s različitim multipletnostima. Prelazi između raz-

ličitih multipletnosti postaju mogući (ali slabog intenziteta) ako se uzme u obzir spin-orbitna sprega. Iz eksperimenta, takođe, može da se vidi da kvantne zabrane nisu potpuno stroge i da se u spektru javljaju linije koje se prema pravilima izbora ne očekuju. Ovo potiče otuda što se pored dipolnih prelaza za koja važe već izneta pravila izbora, javlja i zračenje elektromagnetnih talasa koje potiče od promena električnih momenata višeg reda – pre svega kvadrupolnog momenta atoma. Intenzitet kvadrupolnog zračenja određuje se integralima tipa:

$$\int \psi^*_{n'} r^2 \psi_n dV$$

a dobijaju se pravila izbora: $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$, pod uslovom da zbir kvantnih brojeva koji se kombinuju nije manji od 2. Važi i pravilo: $\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ (prelaz $L' = 0 \rightarrow L = 0$ je zabranjen).

Volfgang Pauli (Wolfgang Pauli, 1900–1958), rođen je u Beču, a studirao je u Minhenu. Kao student A. Zomerfelda u petom semestru napisao je za *Matematičku enciklopediju* pregled o teoriji relativnosti. Godine 1921. u doktoratu je pokazao da je tadašnja kvantna teorija još uvek netačna. Raspravama i analizama sa Hajzenbergom, Borom i Bornom značajno je doprineo razvoju matrične mehanike. Godine 1924. formulisao je princip isključenja (Paulijev princip), za koji je 1945. godine dobio Nobelovu nagradu za fiziku. Iste, 1924. godine, postulirao je postojanje nuklearnog spina da bi objasnio hiperfinu strukturu spektralnih linija. Pošto je izvesno vreme proveo na univerzitetima u Getingenu, Kopenhagenu i Hamburgu vratio se u Cirih, gde je 1928. godine postao profesor na ETH. Godine 1930. predložio je hipotezu o postojanju neutrina. Za vreme Drugog svetskog rata boravio je u SAD, gde se bavio teorijom mezona. Godine 1946. vraća se u Cirih i posvećuje kvantnoj teoriji polja i fizici elementarnih čestica.

Primeri

Primer 9.3.1 Odrediti Ajnštajnovu verovatnoću A_{21} spontane emisije pri prelazu $2p$ – $1s$ kod atoma vodonika. Izračunati i vreme života $2p$ nivoa.

REŠENJE:

Verovatnoća prelaza izračunava se korišćenjem jednačine (9.3.39). Prethodno ćemo izračunati moment prelaza po jednačini:

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^*_{2,1} \vec{p} \psi_{1,0} r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi \,. \qquad (9.3.44)$$

Sa $\psi^*_{2,1}$ označili smo konjugovano kompleksni oblik talasne funkcije $2p$ nivoa, a sa $\psi_{1,0}$ talasnu funkciju $1s$ nivoa. Moment prelaza $\vec{p}$ je vektor čije su komponente u polarnim koordinatama definisane jednačinom (9.3.40), pa se ukupni moment prelaza određuje jednačinom:

$$|p|^2 = |p_x|^2 + |p_y|^2 + |p_z|^2 . \tag{9.3.45}$$

U poglavlju 9.1, jednačinama (9.1.88), (9.1.89) i (9.1.90) definisane su tri $2p$ orbitale: $2p_x$, $2p_y$ i $2p_z$. Trebalo bi, pomoću jednačine (9.3.44) odrediti x, y i z komponentu momenta prelaza za sva tri prelaza: $2p_x$-$1s$, $2p_y$-$1s$ i $2p_z$-$1s$, a to znači izračunavanje devet integrala tipa (9.3.44). Lako se, međutim, pokazuje da je čak šest od tih integrala jednako nuli. Za z-komponentu momenta prelaza između $2p_z$ komponente p nivoa i $1s$ nivoa, može da se pokaže da ima vrednost različitu od nule. Izraz se dobija tako što se u (9.3.44) zamene talasna funkcija $2p_z$ na osnovu jednačine (9.1.90) i talasna funkcija $1s$ nivoa pomoću (9.1.74), a z-komponenta momenta impulsa iz jednačine (9.3.40):

$$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)\cdot 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^r re^{-\frac{r}{2a_0}}e^{-\frac{r}{a_0}}r\cdot r^2dr\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_0^{\pi}\cos\theta\cos\theta\sin\theta d\theta\cdot\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_0^{2\pi}d\varphi .$$

Ova jednačina posle sređivanja izgleda:

$$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)\cdot 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^r e^{-\frac{3r}{2a_0}}r^4dr\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta\cdot\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_0^{2\pi}d\varphi \tag{9.3.46}$$

gde je a_0 prvi Borov poluprečnik. Z-komponente momenta prelaza za druga dva moguća prelaza: $2p_x$-$1s$ i $2p_y$-$1s$ mogu da se dobiju na isti način. One se razlikuju po obliku integrala po uglovima θ i φ . Kako su $2p_x \sim \sin\theta\cos\varphi$ odnosno $2p_y \sim \sin\theta\sin\varphi$, za oba prelaza integrali po uglovima jednaki su nuli. Znači, z-komponenta momenta prelaza različita je od nule samo za prelaz $2p_z - 1s$.

Na sličan način (9.3.46), za x-komponentu momenta prelaza za prelaz $2p_x - 1s$:

$$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)\cdot 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^r e^{-\frac{3r}{2a_0}}r^4dr\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_0^{\pi}\sin^3\theta d\theta\cdot\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_0^{2\pi}\cos^2\varphi d\varphi \tag{9.3.47}$$

koja je, kako će se videti kasnije, različita od nule. Komponenta x momenta prelaza za $2p_z - 1s$ i $2p_y - 1s$ biće nula. Opet se lako vidi da su, s obzirom na to da je $p_z \sim \cos\theta$, a $p_y \sim \sin\theta\sin\varphi$, integrali po uglovima θ i φ x-komponente prelaza $2p_z - 1s$ jednaki nuli, dok je kod prelaza $2p_y - 1s$ integral po uglu φ nula. Komponenta x momenta prelaza različita je od nule samo za prelaz $2p_x - 1s$, prikazan jednačinom (9.3.47). Za prelaz $2p_y - 1s$ y-komponenta momenta prelaza može da se napiše kao:

$$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)\cdot 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^r e^{-\frac{3r}{2a_0}}r^4dr\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_0^{\pi}\sin^3\theta d\theta\cdot\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_0^{2\pi}\sin^2\varphi d\varphi \tag{9.3.48}$$

pa se izračunavanjem pokazuje da je različita od nule. I u ovom slučaju vidi se da su, s obzirom na to da je $p_z \sim \cos\theta$ a $p_x \sim \sin\theta\cos\varphi$, integrali po uglovima θ i φ, y-komponente momenta prelaza $2\ p_z - 1s$ jednaki nuli, dok je kod prelaza $2p_x - 1s$ in-

tegral po uglu φ nula. Potrebno je, dakle, izračunati integral radijalne funkcije, koji je isti u sva tri izraza (9.3.46), (9.3.47) i (9.3.48), i po dva integrala po uglovima θ i φ u svakom od ovih izraza.

Integral po radijalnoj koordinati *r*:

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a_0^4} \int_0^\infty e^{-\frac{3r}{2a_0}} r^4 dr = \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a_0^4} \int_0^\infty e^{\frac{r}{k}} r^4 dr; \qquad k = -\frac{2a_0}{3} \tag{9.3.49}$$

određuje se višestrukim parcijalnim integraljenjem:

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a_0^4} \int_0^\infty e^{\frac{r}{k}} r^4 dr =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a_0^4} \left\{ kr^4 e^{\frac{r}{k}} - 4k\left[kr^3 e^{\frac{r}{k}} - 3k\left(kr^2 e^{\frac{r}{k}} - 2k\left(kre^{\frac{r}{k}} - k^2 e^{\frac{r}{k}} \right) \right) \right] \right\} \Bigg|_0^\infty = \tag{9.3.50}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a_0^4} (4k)(3k)(2k)(k^2) = \frac{1}{\sqrt{6}} 24k^5 a_0 = \frac{1}{\sqrt{6}} 24 \frac{2^5}{3^5} a_0 = 1,29 a_0.$$

Svi integrali u izrazu (9.3.50) koji predstavljaju proizvod funkcije *r* dignute na stepen m > 0 i eksponencijalne funkcije od *r* postaju jednaki nuli posle zamene granica integrala. Poslednji integral u izrazu (9.3.50), koji predstavlja proizvod konstante i eksponencijalne funkcije, određuje vrednost izraza (9.3.50). On je jednak vrednosti konstante ispred eksponencijalne funkcije kada se *r* zameni nulom.

Vrednosti integrala po uglovima θ i φ *z*-komponente momenta prelaza za 2 p_z – 1*s*, određuju se iz:

$$\frac{\sqrt{3}}{4\pi} \int_0^\pi \cos^2\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \cdot \frac{2}{3} \cdot 2\pi = \frac{1}{\sqrt{3}} \tag{9.3.51}$$

a za *x*-komponentu momenta prelaza za 2 p_x – 1*s* iz izraza:

$$\frac{\sqrt{3}}{4\pi} \int_0^\pi \sin^3\theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2\varphi d\varphi = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi = \frac{1}{\sqrt{3}} \tag{9.3.52}$$

dok je za *y*-komponentu momenta prelaza za 2p_y-1*s* taj izraz:

$$\frac{\sqrt{3}}{4\pi}\int_0^{\pi}\sin^3\theta d\theta\int_0^{2\pi}\sin^2\varphi d\varphi = \frac{\sqrt{3}}{4\pi}\cdot\frac{3}{4}\cdot\pi = \frac{1}{\sqrt{3}}. \tag{9.3.53}$$

Prema tome, tri komponente momenta prelaza imaju iste vrednosti integrala po uglovima θ i φ, pa su momenti prelaza međusobno jednaki, što potvrđuje činjenicu da su sve tri $2p$ orbitale ($2p_x$, $2p_y$ i $2p_z$) međusobno ekvivalentne. Prema (9.3.45) kvadrat momenta prelaza je:

$$|p|^2 = 3\cdot 1,29^2\cdot\frac{1}{\sqrt{3}}a_0^2 = 1,66a_0^2.$$

Da bi se odredila verovatnoća prelaza $A_{2,1}$ (odnosno vreme života τ) treba da se zna frekvencija zračenja. Ona se određuje iz izraza za energiju (9.1.63) koji je dobijen rešavanjem Šredingerove jednačine. Ovaj izraz identičan je jednačini (4.2.38) za energiju vodonikovog atoma prema Borovom modelu. Prelaz se vrši iz kvantnog stanja $n = 2$ na $n = 1$, ali, u skladu s pravilima izbora, sa $2p$ na $1s$ nivo. Energija (prelaza) zavisi samo od glavnog kvantnog broja. Prema tome, frekvencija je:

$$\nu = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\cdot\frac{4\pi^2 me^4}{2h^3}\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2}\right). \tag{9.3.54}$$

Kada se u (9.3.54) zamene masa elektrona m, naelektrisanje elektrona e, Plankova konstanta h i kvantni brojevi $n = 2$ i $m = 2$, dobija se da je frekvencija prelaza $\nu = 1,64\cdot10^{15}\,s^{-1}$. Vrednost frekvencije, zajedno s kvadratom momenta prelaza, naelektrisanjem elektrona e, Plankovom konstantnom h i brzinom svetlosti c, zamene se u izrazu za verovatnoću prelaza prema (9.3.39), posle čega se dobija rezultat za $A_{12}=3,3\cdot10^8 s^{-1}$, a za vreme boravka $\tau=3,3\cdot10^{-9}\,s$.

10. ATOMSKO JEZGRO

Bilo je mnogo hipoteza o građi atoma koje su bile više plod mašte nego sistematskih i činjenicama potkrepljenih istraživanja. Prvi, na eksperimentima zasnovan, model bio je Tomsonov „plum puding" model atoma, 1903. godine. Po ovom modelu elektroni su raspoređeni po masi atoma u izvesnim položajima. Frekvencija oscilovanja elektrona oko tih ravnotežnih položaja odgovara frekvenciji zračenja koje atom emituje. Ovaj model nije mogao da opiše kvantitativno nijedan eksperiment, ali nije bio ni u protivrečnosti sa do tada poznatim eksperimentima. Novim eksperimentima koje je započeo Raderford, a koji nisu mogli da se protumače Tomsonovim modelom, postavljeni su temelji savremenog shvatanja nuklearne strukture atoma:

Godine 1906. E. Raderford je ispitivao rasejavanje alfa-čestica na metalnim listićima, s ciljem da ispita prodornost alfa-zraka;

Godine 1910. H. Gajger i E. Marsden, Raderfordovi saradnici, opazili su slučajeve rasejavanja alfa-čestica u kojima je ugao rasejavanja bio skoro 180°;

Godine 1911. E. Raderford postavlja planetarni model atoma: unutar atoma nalazi se pozitivno naelektrisano jezgro, malih dimenzija, u kojem je usredsređena praktično celokupna masa atoma, a oko jezgra kruže elektroni;

Godine 1911–1912. H. Gajger i E. Marsden eksperimentalno su potvrdili ispravnost Raderfordove postavke;

Godine 1912. P. Bleket, pomoću tek otkrivene Vilsonove komore, dobio je fotografije tragova alfa-čestica koji su imali oštre prelome. Prelomi potiču od jednostrukih sudara (rasejavanja) alfa-čestica s atomima gasa u komori;

Godine 1913. A. Van-den Bruk primetio je da podaci o rasejavanju alfa-čestica mogu najlakše da se objasne ako se pretpostavi da je naelektrisanje jezgra umnožak elementarnog naelektrisanja elektrona i rednog broja elementa Ze;

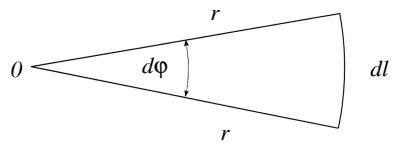
Godine 1914. H. Mozli, mereći frekvencije karakterističnog x-zračenja, potvrdio je Van-Brukovu hipotezu.

10.1 RADERFORDOV OGLED

DODATAK 10.1

D-10.1.1 Merenje uglova

Ugao je odnos dužine kružnog luka i poluprečnika kruga, a izražava se u radijanima:



Slika D-10.1.1 Definicija ugla.

$$d\varphi = \frac{dl}{r} \qquad \text{(radijana)} \qquad \text{(D-10.1.1a)}$$

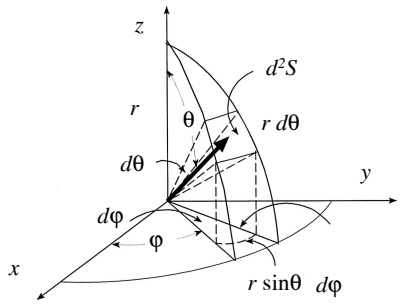
$$\varphi_{max} = \frac{l_{max}}{r}$$

$$\varphi_{max} = \oint_{krug} \frac{dl}{r} = \frac{2r\pi}{r} = 2\pi. \qquad \text{(D-10.1.1b)}$$

Dakle, puni ugao ima 2π radijana.

Prostorni ugao je odnos površine dela sfere i kvadrata poluprečnika sfere, a izražava se u steradijanima:

$$d^2\Omega = \frac{d^2S}{r^2} \qquad \text{(steradijana)} \qquad \text{(D-10.1.2a)}$$



Slika D-10.1.2 Definicija prostornog ugla.

Sa slike vidimo da je:

$$d^2S = r\,d\theta\; r\sin\theta\; d\varphi = r^2\, d\theta \sin\theta\; d\varphi$$

pa je:

$$d^2\Omega = \sin\theta\; d\theta\; d\varphi. \qquad \text{(D-10.1.2b)}$$

Pun prostorni ugao je:

$$\Omega_{max} = \oint_{ster}\oint d^2\Omega$$

$$\Omega_{max} = \int_0^{\pi} \sin\theta\; d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \qquad \text{(D-10.1.2c)}$$

$$\Omega_{max} = 4\pi \quad \text{(steradijana).}$$

D-10.1.2 Moment impulsa u polju centralne sile

Pri kretanju tela u polju centralne sile, energija i moment količine kretanja su stalni. U zavisnosti od smera delovanja sile, kao i uzajamnog odnosa potencijalne i kinetičke energije tela, putanja može da ima oblik elipse ili hiperbole. Moment impulsa izračunava se u odnosu na centar sile koji je smešten u žiži putanje:

(D-4.6.2)
$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

a pošto je:

$$\vec{p} = m\,\vec{\upsilon}$$

(D-4.6.4) $$\vec{L} = m\,\vec{r}\times\vec{\upsilon}\,.$$

Kod hiperbolične putanje, koja se sreće pri razmatranju Raderfordovog ogleda, ugao φ između radijus vektora $\vec{r}$ i brzine $\vec{\upsilon}$, može da bude proizvoljan u intervalu od 0 do π. Vektor brzine $\vec{\upsilon}$ tada možemo da razložimo na dve komponente, normalnu (ili tangencijalnu, $\vec{\upsilon}_t$) i paralelnu (ili radijalnu $\vec{\upsilon}_r$) sa $\vec{r}$:

$$\vec{\upsilon} = \vec{\upsilon}_r + \vec{\upsilon}_t.$$

Od njih samo normalna komponenta $\vec{\upsilon}_t$ daje doprinos momentu pošto je vektorski proizvod paralelnih vektora jednak nuli [$(\vec{r}\times\vec{\upsilon}_r = 0$ (D-2.2.3c)]:

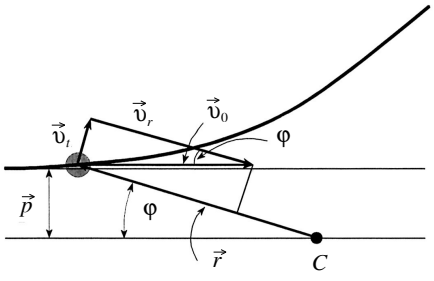
$$\begin{aligned}\vec{L} &= m\,\vec{r}\times(\vec{\upsilon}_r + \vec{\upsilon}_t)\\ &= m\,\vec{r}\times\vec{\upsilon}_t\,.\end{aligned}$$

Otuda je:

$$L = m\,\upsilon_t r\,.$$

U eksperimentima rasejavanja, kao što je prikazano na Slici 10.1.3, početni uslovi određuju se na osnovu osobina čestice (projektila) pre nego što dođe do sudara sa metom (tj. pre nego što počne značajno da deluje centralna sila) Tada čestica ima početnu brzinu υ_0, masu m i položaj koji određujemo preko parametra sudara p. Ovaj parametar predstavlja najmanje moguće rastojanje na koje bi meta i projektil mogli da se dovedu, kada između njih ne deluje nikakva sila. Pošto je moment količine kretanja stalan, njegovu veličinu možemo da nađemo ako ga izračunamo za česticu koja se nalazi daleko od centra rasejanja. Tada je:

$$L = m\,\upsilon_t r.$$



Slika D-10.1.3 Moment impulsa tela koje se kreće u polju centralne sile je stalan: $\vec{L} = m\,\vec{r}\times\vec{\upsilon}_t$. Pošto se na putanji čestice menja $\vec{r}$, to će i tangencijalna brzina, $\vec{\upsilon}_t$ biti promenljiva, a samim tim i kinetička energija. Međutim, ukupna energija ostaje stalna.

Sa Slike D-10.1.3 vidi se da je:

$$\upsilon_t = \upsilon_0 \sin\varphi$$

odakle dobijamo:

$$L = m\,\upsilon_0\, r\sin\varphi.$$

Pošto je:

$$p = r\sin\varphi$$

neposrednim zamenjivanjem dobijamo da je:

$$L = m\,\upsilon_0 p. \tag{D-10.1.3}$$

D-10.1.3 Energija u polju centralne sile

Centralnom silom nazivamo silu kod koje pravac delovanja sve vreme prolazi kroz jednu tačku, a intenzitet zavisi samo od rastojanja od te tačke. Najpoznatije centralne sile su gravitaciona i Kulonova sila. Pošto veličina sile zavisi samo od rastojanja merenog od centra sile, centralna sila vrši rad jedino kada se to rastojanje menja:

$$A = \int_{r_1}^{r_2} \vec{F}_c d\vec{r}. \tag{D-10.1.4}$$

Tada možemo da definišemo potencijalnu energiju kao rad koji izvrši centralna sila da bi se postiglo željeno uređenje. Pri tome, potencijalna energija jednaka je nuli kada je centralna sila jednaka nuli, tj. kada $r \to \infty$:

$$U(d) = \int_{\infty}^{d} \vec{F}_c d\vec{r} = -\int_{d}^{\infty} \vec{F}_c d\vec{r}. \tag{D-10.1.5}$$

Diferenciranjem dobijenog izraza možemo da izrazimo centralnu silu preko njenog potencijala:

$$F_c = -\frac{\partial U}{\partial r}. \tag{D-10.1.6}$$

Sada ćemo da pokažemo to da se u polju centralne sile ukupna energija sistema ne menja. Izražavanjem sile preko II Njutnovog zakona, jednačina (D-2.2.1c):

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= -\frac{\partial U}{\partial x} \\ m\ddot{y} &= -\frac{\partial U}{\partial y} \\ m\ddot{z} &= -\frac{\partial U}{\partial z} \end{aligned} \tag{D-10.1.7}$$

množenjem jednačina redom sa $\dot{x}$, $\dot{y}$ i $\dot{z}$ i sabiranjem dobijamo:

$$m(\dot{x}\ddot{x} + \dot{y}\ddot{y} + \dot{z}\ddot{z}) = -\left(\frac{\partial U}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial U}{\partial y}\dot{y} + \frac{\partial U}{\partial z}\dot{z}\right). \tag{D-10.1.8}$$

Ako levu i desnu stranu dobijene jednačine izrazimo kao izvode po vremenu, imamo:

$$m\left(\dot{x}\frac{d\dot{x}}{dt}+\dot{y}\frac{d\dot{y}}{dt}+\dot{z}\frac{d\dot{z}}{dt}\right) = -\frac{dU}{dt}$$

i posle sređivanja:

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)\right] = -\frac{dU}{dt} \qquad \text{(D-10.1.9)}$$

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}m(\upsilon_x^2+\upsilon_y^2+\upsilon_z^2)\right] = -\frac{dU}{dt}.$$

Prebacivanjem izvoda po vremenu sa desne strane na levu, uz $\upsilon^2 = \upsilon_x^2 + \upsilon_y^2 + \upsilon_z^2$, dobijamo:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}m\upsilon^2+U\right) = 0$$

$$\frac{d}{dt}(T+U) = 0 \qquad \text{(D-10.1.10a)}$$

odakle neposredno sledi:

$$T+U = const.$$

$$E = const. \qquad \text{(D-10.1.10b)}$$

dakle, pri kretanju u polju centralne sile ukupna energija je stalna.

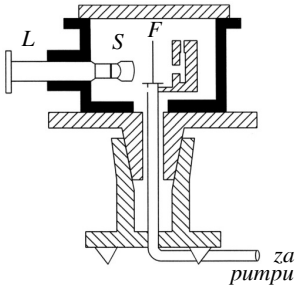
Bilo je poznato da alfa-čestice mogu da se otkriju, kao i elektron, na osnovu svetlosnog bljeska koji izazivaju na fluorescentnom ekranu. Kada kolimisani snop brzih alfa-čestica pada na fluorescentni zaklon, na njemu se pojavljuje svetla tačka oštrih ivica. Ako se na put alfa-česticama stavi tanak metalni list, najveći broj čestica prolazi kroz njega, ali svetleća tačka na ekranu postaje razmazana. To se objašnjavalo sudarima alfa-čestica s atomima metalne folije. Međutim, Gajger je uočio to da pored slabog rasejavanja oko prvobitne putanje alfa-čestice, postoji i mali broj čestica koje su rasejane pod mnogo većim uglovima nego što je moglo da se objasni na osnovu tadašnjeg shvatanja strukture atoma. Ovu protivrečnost rešio je Raderford, pokazavši da za dobijanje tako velikih uglova rasejanja celokupna masa i pozitivno naelektrisanje atoma moraju da budu skoncentrisani u relativno malom delu zapremine atoma.

10.1.1 Rasejavanje alfa-čestica na tankoj foliji

Ključne oglede rasejavanja alfa-čestica na tankim metalnim folijama izveli su Gajger i Marsden pod Raderfordovim rukovodstvom. Oni su tanke folije metala bombardovali snopom alfa-čestica iz radioaktivnog izvora RaC (^{214}Bi). Njihova aparatura prikazana je na Slici 10.1.1.

Radioaktivni izvor R emituje alfa-čestice, koje posle prolaska kroz kolimator, padaju na tanku metalnu foliju F. Rasejane alfa-čestice otkrivaju se na fluorescentnom zaklonu S koji se posmatra kroz sistem sočiva L. Sistem sočiva može da se okreće oko ose folije, pa to pruža mogućnost da se otkriju čestice rasejane pod različitim uglovima θ. Cela komora može da se evakuiše da bi se izbegli sudari alfa-čestica sa molekulima vazduha.

Na Raderfordovo iznenađenje, neke od čestica bile su rasejane pod uglovima od skoro 180°, vraćajući se, praktično, nazad ka izvoru. Po Raderfordovim rečima: *„Bio je to najneverovatniji događaj u mom životu. To je isto tako neverovatno kao kada biste na list papira ispalili topovsko zrno prečnika 15 inča (≈38 cm), a ono se od njega odbije i pogodi vas”.*



Slika 10.1.1 Aparatura Gajgera i Marsedena za ispitivanje rasejavanja alfa-čestica.

Analizirajući problem, Raderford je izveo čuvenu jednačinu iz koje može da se izračuna broj čestica rasejanih pod bilo kojim uglom i da se uporedi s eksperimentalnim rezultatima. Mada je Raderford jednačinu izveo primenom klasične mehanike i klasične elektrodinamike, ona je ista kao i jednačina koja je mnogo godina kasnije izvedena kvantno-mehaničkim metodama. Važno je da se primeti da je to jedan od retkih slučajeva u kojem klasične metode primenjene na ispitivanje atomskih pojava daju valjane rezultate. Ako se čestica malih dimenzija, koja ima pozitivno naelektrisanje, primiče drugoj čestici malih dimenzija sa istim naelektrisanjem, onda je odbojna sila između njih obrnuto proporcionalna kvadratu njihovog međusobnog rastojanja (Kulonov zakon).

Naravno, ne može se tvrditi da će Kulonov zakon da važi i na najmanjim mogućim rastojanjima. Međutim, ako važi i ako je pozitivno naelektrisanje atoma skoncentrisano samo u njegovom središtu, u jezgru, koje je veoma malo u poređenju sa samim atomom, rastojanje između naelektrisanih čestica moglo bi da bude veoma malo, pa prema tome i odbojna sila dovoljno velika da izazove skretanje čestice pod velikim uglovima.

Jedini način da se ispravnost ovih pretpostavki proveri jeste da se izvede jednačina za rasejavanje alfa-čestica pod ovim uslovima i da se uporedi s odgovarajućim eksperimentalnim rezultatima.

10.1.2 Čestica u polju centralne sile (alfa-čestica u polju jezgra)

Razmotrimo kretanje alfa-čestice u polju pozitivnog jezgra. Ako se čestica mase M kreće početnom brzinom υ_0, tada je njena (početna) kinetička energija:

$$T_0 = \frac{M\upsilon_0^2}{2}. \tag{10.1.1a}$$

Pod pretpostavkom da važi Kulonov zakon, potencijalna energija alfa-čestice, čije je naelektrisanje $+ze$($z = 2$), u polju jezgra sa naelektrisanjem $+Ze$, je:

$$U = +\frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} \tag{10.1.1b}$$

gde je r rastojanje između jezgra i alfa-čestice. Pri kretanju čestice u polju centralne sile, energija sistema E i moment količine kretanja u odnosu na centar sile L su stalne:

(4.6.7) $$E = T + U = \frac{M}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + \frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} = const. \qquad (10.1.2)$$

(D-4.6.3b) $$L = M r^2\dot{\varphi} = const. \qquad (10.1.3)$$

Jednačine su napisane u polarnim koordinatama, pri čemu je r radijus vektor, a φ ugao. Mada su ukupna energija i moment količine kretanja očuvani na putanji čestice, zbog promene njenog položaja menjaju se kako potencijalna i kinetička energija, tako i tangencijalna i radijalna brzina.

Sada želimo da nađemo oblik putanje alfa-čestice pri prolasku pored nepokretnog atomskog jezgra. Tehnički, problem se rešava na isti način kao kod izračunavanja orbite elektrona u Bor-Zomerfeldovoj teoriji. Početne jednačine su vrlo slične. Jedino je različit predznak potencijalne energije. Ponavljanjem postupka koji smo primenili kod Bor-Zomerfeldove teorije, odeljak 4.6.2, iz poslednje dve jednačine oslobađamo se izvoda po vremenu i uvođenjem smene:

$$\rho = \frac{1}{r} \qquad (10.1.4)$$

dobijamo diferencijalnu jednačinu putanje alfa-čestice:

(4.6.14) $$\left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right)^2 \frac{L^2}{2M} + \frac{L^2}{2M}\rho^2 = E - \frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\rho$$

$$\left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right)^2 = \left(\frac{2M}{L^2}\right)E - \left(\frac{2M}{L^2}\right)\left(\frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\rho - \rho^2. \qquad (10.1.5)$$

Ponovnim diferenciranjem dobijamo oblik iz kojeg se jednačina najlakše rešava:

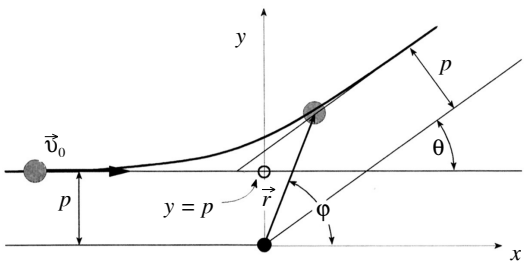
$$2\left(\frac{d^2\rho}{d\varphi^2}\right)\left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right) = 0 - \left(\frac{2M}{L^2}\right)\left(\frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right) - 2\rho\left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right). \qquad (10.1.6)$$

Deljenjem poslednjeg izraza sa $2(d\rho/d\varphi)$, najzad dobijamo:

$$\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \rho = C; \qquad C = -\frac{1}{2}\left(\frac{2M}{L^2}\right)\left(\frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\right). \qquad (10.1.7)$$

Opšte rešenje ove diferencijalne jednačine drugog reda ima oblik:

(4.6.21) $$\rho = C + A\cos\varphi + B\sin\varphi. \qquad (10.1.8)$$



Slika 10.1.2 Kretanje alfa-čestice u polju jezgra. Kada nema međudejstva sa jezgrom alfa-čestica ima brzinu υ_0.

Za datu fizičku situaciju konstante A i B određuju se na osnovu početnih uslova. Za slučaj koji razmatramo, početni uslovi mogu da se odrede sa Slike 10.1.2. Alfa-čestica koja je beskonačno udaljena od atomskog jezgra ima y-koordinatu koja je jednaka parametru sudara p. Tada je $\rho = 0$ i $\varphi = \pi$. Zamenjivanjem ovih vrednosti u (10.1.8) dobijamo:

$$0 = C + A\cos\pi + B\sin\pi \tag{10.1.9}$$

i pošto je $\sin\pi = 0$ i $\cos\pi = -1$

$$A = C. \tag{10.1.10}$$

Konstantu B izrazićemo pomoću parametra sudara p, čiji je smisao očigledan sa slike: p predstavlja rastojanje između putanje alfa-čestice, kada ova još uzajamno ne dejstvuje sa jezgrom, i prave koja je sa njom paralelna i koja prolazi kroz jezgro. U opštem slučaju, ordinatu y izražavamo preko r i φ očiglednim odnosom:

(D-4.6.28) $$y = r\sin\varphi$$

odnosno:

$$\frac{1}{y} = \frac{1}{r\sin\varphi} = \frac{\rho}{\sin\varphi}. \tag{10.1.11a}$$

Zamenom vrednosti ρ iz (10.1.8) u poslednjem izrazu, dobijamo:

$$\frac{1}{y} = \frac{C + C\cos\varphi + B\sin\varphi}{\sin\varphi} = C\frac{1+\cos\varphi}{\sin\varphi} + B. \tag{10.1.11b}$$

Uvrštavanjem vrednosti iz početnih uslova u ovu jednačinu, $\rho = 0$, $\varphi = \pi$, $y = p$, dobijamo:

$$\frac{1}{p} = C\frac{1+\cos\pi}{\sin\pi} + B \tag{10.1.12a}$$

i kako je:

$$\lim_{\varphi\to\pi}\frac{1+\cos\varphi}{\sin\varphi} = 0$$

$$B = \frac{1}{p}. \tag{10.1.12b}$$

Prema tome, jednačina putanje čestice je:

$$\rho = C(1 + \cos\varphi) + \frac{\sin\varphi}{p}. \tag{10.1.13}$$

Celokupna putanja čestice ne može da se prati eksperimentalno. Može da se prati samo položaj čestice pre i posle međudejstva sa jezgrom. U oba ova granična slučaja čestica se kreće pravolinijski i ugao rasejavanja jednak je uglu između ove dve pravolinijske putanje. Takođe, u oba slučaja je $\rho = 0$. Ugao rasejavanja θ nalazimo uvrštavanjem poslednjeg uslova u jednačinu putanje, tj. za $\varphi = \theta$, $\rho = 0$:

$$0 = C(1 + \cos\theta) + \frac{\sin\theta}{p}$$

odnosno:

$$-\frac{1}{Cp} = \frac{1 + \cos\theta}{\sin\theta} = \operatorname{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right). \tag{10.1.14a}$$

Zamenjivanjem vrednosti za C, iz (10.1.7), dobijamo:

$$\operatorname{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{2}{p}\left(\frac{L^2}{2M}\right)\left(\frac{4\pi\varepsilon_0}{zZe^2}\right). \tag{10.1.14b}$$

Izražavajući moment količine kretanja preko parametra sudara, jednačina (D-10.1.3), dobijamo:

$$\operatorname{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right) = 2p\left(\frac{M\upsilon_0^2}{2}\right)\left(\frac{4\pi\varepsilon_0}{zZe^2}\right) \tag{10.1.14c}$$

i najzad, zamenjivanjem početne brzine υ_0 početnom kinetičkom energijom T_0 prema (10.1.1a):

$$\operatorname{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right) = 2pT_0\left(\frac{4\pi\varepsilon_0}{zZe^2}\right). \tag{10.1.14d}$$

Dobijeni izraz možemo dalje da uprostimo ako uočimo da izraz u zagradi pomnožen parametrom sudara p, predstavlja potencijalnu energiju čestice kada bi se ova našla na rastojanju p od atomskog jezgra:

$$\operatorname{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right) = 2\frac{T_0}{U_p}. \tag{10.1.14e}$$

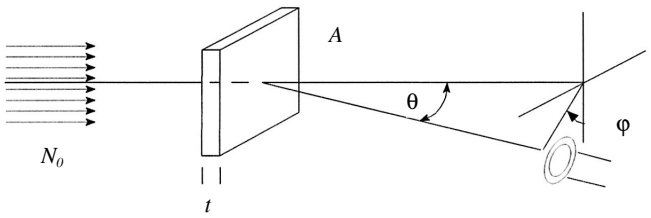
i dalje, ako izrazimo proizvod izraza u zagradi i početne kinetičke energije T_0, preko najmanjeg rastojanja d, na koje čestica može da priđe atomskom jezgru pomoću izraza (P-10.1.3.1):

$$\operatorname{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{2p}{d}. \tag{10.1.14f}$$

Tako smo došli do jednačine koja povezuje ugao rasejavanja alfa-čestica sa parametrima njenog međudejstva s atomskim jezgrom. Nažalost, parametar p od kojeg zavisi ugao skretanja ne može da se meri neposredno. Zbog toga treba opštim razmatranjem eksperimenta rasejavanja da se pronađe veza između parametra sudara p i veličina koje su dostupne neposrednom merenju.

10.1.3 Klasični opis eksperimenta rasejavanja

Na Slici 10.1.3 prikazana je šema eksperimenta rasejavanja. Upadni snop sastoji se od čestica istih energija. Neka N_0 čestica u sekundi prolazi kroz površinu mete A:



Slika 10.1.3 Rasejavanje čestica na jednom centru.

$$I = \frac{N_0}{A} \tag{10.1.15a}$$

normalnu na pravac njihovog kretanja. Tada je intenzitet snopa (fluks) jednak odnosu ukupnog broja čestica N_0 koje padaju na metu u jedinici vremena i veličine površine mete A. Zbog rasejavanja na meti, detektor postavljen pod uglovima θ i φ u odnosu na pravac kretanja upadnog snopa, zabeležiće N_n čestica u jedinici vremena. Ako je fluks čestica stalan po celoj površini mete, $I = const.$, tada izraz (10.1.15a) možemo da primenimo i na čestice koje registruje detektor, a koje se rasejavaju sa dela površine mete čija je veličina σ:

$$I = \frac{N_n}{\sigma}. \tag{10.1.15b}$$

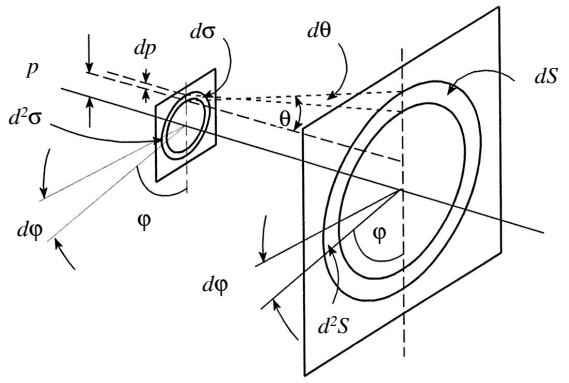
Pošto su nam upadni fluks I i broj rasejanih čestica N_n poznati, veličina površine sa koje su čestice rasejane dobija se neposredno iz (10.1.15b):

$$\sigma = \frac{N_n}{I}. \tag{10.1.16a}$$

Parametar σ naziva se efikasni presek rasejavanja i predstavlja veličinu površine sa koje se rasejavaju detektovane čestice. Efikasni presek je veoma zanačajna veličina, jer može kao geometrijski činilac, da se poveže sa parametrom sudara p čija nam

vrednost, kako smo videli u jednačini (10.1.14c), nedostaje da bismo problem rešili do kraja.

Međutim, efikasni presek određen izrazom (10.1.16a) nije od velike koristi jer nisu standardizovani uslovi pod kojima je izmeren broj čestica N_n. Da bismo došli do izraza za efikasni presek koji ima opšte značenje, moramo da uzmemo u obzir prostorni ugao u koji su rasejane detektovane čestice, ukupan broj čestica koje padaju na metu, broj centara rasejavanja, itd. Zbog toga ćemo da razmotrimo slučaj rasejavanja čestica sa mete koja ima samo jedan centar rasejavanja, a čija je geometrija prikazana na Slici 10.1.4. Čestice koje prođu kroz prsten poluprečnika p (parametar sudara) i debljine dp rasejaće se u konus pod uglom θ u intervalu $d\theta$.



Slika 10.1.4 U delu površine između θ i $\theta + d\theta$ i φ i $\varphi + d\varphi$ mogu da se detektuju samo čestice koje su prošle u okolini centra rasejavanja na rastojanju između p i $p + dp$, pod uglom između φ i $\varphi + d\varphi$.

Ako je $dN_1(\theta)$ broj čestica koje se raseju (sa **jednog** centra) pod naznačenim uglovima, imajući na umu stalnost upadnog fluksa, iz jednačine (10.1.16a) dobijamo:

$$d\sigma = \frac{dN_1(\theta)}{I} \tag{10.1.16b}$$

gde je $d\sigma$ veličina površine naznačenog kružnog prstena na meti.

S obzirom na cilindričnu simetriju problema (čestice se uvek rasejavaju radijalno u odnosu na osu koja prolazi kroz metu, a koja je paralelna pravcu upadnog fluksa a zbog stalnosti fluksa čestice se ravnomerno raspršuju na sve strane), fluks čestica po delu površine dS, koji je određen uglom rasejavanja θ i ugaonim intervalom $d\theta$ je konstantan i ne zavisi od azimutalnog ugla φ. Detekcija čestica vrši se samo u određenom delu prostora, u malom delu kružnog prstena, koji je određen prostornim uglom $d^2\Omega$ (uglovima θ, φ, intervalima $d\theta$ i $d\varphi$, te poluprečnikom r). Zato je korisno da se problem svede na broj čestica $d^2N_1(\theta,\varphi)$, koje su detektovane u delu površine d^2S. Na deo površine d^2S padaju samo čestice koje su na meti prošle kroz deo površine $d^2\sigma$, Slika 10.1.4. Pri stalnom fluksu, u saglasnosti s izrazima (10.1.16a, b), važi:

$$d^2\sigma = \frac{d^2N_1(\theta,\varphi)}{I}. \tag{10.1.17}$$

Efikasni presek $d^2\sigma$ odnosi se na deo površine mete kroz koju prolaze čestice detektovane pod uglovima θ i φ, u intervalima $d\theta$ i $d\varphi$ [$d^2N_1(\theta,\varphi)$ čestica u jedinici vremena]. S obzirom na to da za date uglove θ, φ, $d\theta$ i $d\varphi$ detektor može da ima veću ili manju površinu, da može da bude bliži ili dalji u odnosu na metu, broj registrovanih čestica na površini d^2S je promenljiv. Da bi se standardizovali uslovi merenja, korisno je da se uvede **difrencijalni efikasni presek** čija veličina ne zavisi od lokalne geometrije. To je efikasni presek za rasejavanje čestica u pravcu θ, φ, $d\theta$, $d\varphi$ normiran na jedinični prostorni ugao. Izračunava se tako što se efikasni presek $d^2\sigma$ podeli veličinom dela prostornog ugla u koji se sa njega čestice rasejavaju. Diferencijalni efikasni presek dobijamo ako jednačinu (10.1.17) podelimo delom prostornog ugla u koji se raseje $d^2N_1(\theta,\varphi)$ čestica:

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{d^2N_1(\theta,\varphi)}{Id^2\Omega}. \tag{10.1.18a}$$

U ovoj jednačini na desnoj strani imamo veličine koje eksperimentalno možemo da merimo (fluks, broj čestica koje beleži detektor u jedinici vremena i prostorni ugao koji zahvata vidno polje detektora). Na desnoj strani jednačine nalazi se diferencijalni efikasni presek, veličina koju možemo da povežemo sa parametrom sudara p. Sa Slike 10.1.4 očigledno je da je:

$$d\sigma = pdp\varphi_{max} = pdp2\pi$$

i:

$$d^2\sigma = pdpd\varphi$$

pa je [uz $d^2\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$, jednačina (D-10.1.2b)]:

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{p\, dp\, d\varphi}{\sin\theta\, d\theta\, d\varphi} \tag{10.1.18b}$$

i posle skraćivanja:

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{p\, dp}{\sin\theta\, d\theta}. \tag{10.1.18c}$$

Kombinovanjem izraza (10.1.18a) i (10.1.18c), najzad dobijamo vezu između eksperimentalnih i teorijskih parametara:

$$\frac{p}{\sin\theta}\frac{dp}{d\theta} = \frac{d^2N_1(\theta,\varphi)}{Id^2\Omega}. \tag{10.1.19}$$

Za specifično međudejstvo između čestica, prvo pronalazimo vezu između p i θ (što smo učinili u prethodnom odeljku), zatim izračunavamo $dp/d\theta$, pa zamenjivanjem u izrazu (10.1.18c) dobijamo diferencijalni efikasni presek.

10.1.4 Rasejavanje alfa-čestica na atomskom jezgru

Za slučaj koji smo razmatrali u prethodnom odeljku izračunaćemo diferencijalni presek iz izraza (10.1.18c). Rešavanjem jednačine (10.1.14d) po p dobijamo:

$$p = \frac{1}{2T_0}\left(\frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\mathrm{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right) = k\ \mathrm{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{10.1.20}$$

gde smo konstantu k:

$$k = \frac{1}{M\upsilon_0^2}\left(\frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\right) = \frac{zZ}{2T_0}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right) \tag{10.1.21}$$

uveli radi jednostavnosti. Izvod $dp/d\theta$ nalazimo neposrednim diferenciranjem jednačine (10.1.20):

$$\frac{dp}{d\theta} = -\frac{k}{2}\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}. \tag{10.1.22a}$$

Negativni znak pokazuje samo to da ugao skretanja opada sa porastom rastojanja p, što nema značaja za dalje razmatranje. Zbog toga ćemo da koristimo samo apsolutnu vrednost dobijenog izraza:

$$\left|\frac{dp}{d\theta}\right| = +\frac{k}{2}\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}. \tag{10.1.22b}$$

Zamenom izraza (10.1.20) i (10.1.22b) u jednačinu (10.1.18c) dobijamo:

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{k^2}{4}\frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \tag{10.1.23a}$$

i uvrštavanjem vrednosti za k iz jednačine (10.1.21):

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{M\upsilon_0^2}\frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \tag{10.1.23b}$$

$$= \frac{1}{4}\left(\frac{zZ}{2T_0}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}.$$

Ovo je čuvena Raderfordova jednačina za ugaonu zavisnost diferencijalnog preseka rasejanja.

Sada treba diferencijalni presek da izrazimo preko eksperimentalnih parametara koje srećemo u realnom slučaju:

– imamo metu debljine t i površine A sa n atoma u jedinici zapremine. Ako je debljina mete dovoljno mala, tako da ne dolazi do uzajamnog prekrivanja centara rasejavanja, njihov broj jednak je broju atoma u meti $A\ t\ n$;

– upadni snop čestice iste energije ima fluks od I čestica po jedinici površine u jedinici vremena. Tada na metu površine A u jedinici vremena pada $I\ A$ čestica, jednačina (10.1.15a);

– eksperimentalno merimo broj čestica $d^2N_n(\theta,\varphi)$ koje se u jedinici vremena raseju u prostornom uglu $d^2\Omega$ pri položaju detektora (θ,φ). Indeks n označava da se čestice rasejavaju sa velikog broja centara, a ne samo sa jednog kao što smo do sada razmatrali. Isto tako, merimo i ukupni broj čestica N_0 koje padaju na metu u jedinici vremena;

– ukupni broj čestica rasejanih sa mete pod određenim uglom $d^2\Omega$ u pravcu (θ,φ) jednak je proizvodu broja čestica rasejanih sa jednog centra i ukupnog broja centara u meti:

$$d^2N_n(\theta,\varphi) = n\ A\ t\ d^2N_1(\theta,\varphi). \tag{10.1.24}$$

Broj čestica rasejanih sa mete u jediničnom prostornom uglu u odnosu na ukupan broj čestica koje padaju na metu $d^2N_n/(N_0d^2\Omega)$, dobijamo deljenjem izraza (10.1.24) sa $N_0d^2\Omega$:

$$\frac{d^2N_n(\theta,\varphi)}{N_0d^2\Omega} = \frac{n\ A\ t}{N_0}\frac{d^2N_1(\theta,\varphi)}{d^2\Omega}. \tag{10.1.25}$$

Ovde, s leve strane jednačine imamo veličine koje neposredno merimo, a s desne veličine koje su u vezi sa diferencijalnim presekom rasejavanja $d\sigma/d\Omega$. Ako u jednačinu (10.1.25) uvrstimo diferencijalni presek rasejavanja iz jednačine (10.1.18a), imajući u vidu izraz (10.1.15a), dobijamo:

$$\frac{d^2N_n(\theta,\varphi)}{N_0d^2\Omega} = n\ t\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \tag{10.1.26a}$$

a zamenom diferencijalnog preseka iz jednačine (10.1.23a):

$$\frac{d^2N_n(\theta,\varphi)}{N_0d^2\Omega} = \frac{n\ t\ k^2}{4}\frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}. \tag{10.1.26b}$$

Budući da je broj čestica u jedinici zapremine:

$$n = \rho\frac{N_A}{M_A}$$

gde je ρ gustina mete (ne treba ga pomešati s istim simbolom koji je ranije korišćen kao pomoćna promenljiva), N_A Avogadrov broj i M_A atomska masa mete, a uzimajući vrednost konstante k iz jednačine (10.1.21), konačno dobijamo:

$$\frac{d^2N_n(\theta,\varphi)}{N_0 d^2\Omega} = \frac{1}{4}\frac{\rho N_A t}{M_A}\left(\frac{zZ}{2T_0}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}. \qquad (10.1.26c)$$

Ovde je:

N_0 – ukupni broj čestica koje padaju na metu u jedinici vremena,

$d^2N_n(\theta,\varphi)$ – broj čestica u jedinici vremena koje registruje detektor koji je postavljen u položaj određen uglovima θ, φ,

$d^2\Omega$ – element prostornog ugla koji obuhvata vidno polje detektora,

ρ – gustina materijala od kojeg je napravljena meta,

t – debljina mete,

M_A – atomska masa mete,

N_A – Avogadrov broj,

Z – redni broj atoma mete,

z – naelektrisanje čestice projektila (za alfa-česticu $z = 2$),

e – elementarno naelektrisanje,

T_0 – početna kinetička energija čestice (projektila) $T_0 = M\upsilon^2_0/2$,

M – masa alfa-čestice,

$\vec{\upsilon}_0$ – brzina alfa-čestice,

θ – ugao rasejavanja,

$e^2/4\pi\varepsilon_0 = 1{,}440\ e\text{V nm}$.

10.1.5 Upoređivanje Raderfordove jednačine s eksperimentom

Ispravnost jednačine (10.1.26c) proverili su Gajger i Marsden nizom novih eksperimenata. Označimo, radi jednostavnosti, relativni broj čestica rasejan u pravcu θ, φ koji je obračunat na jedinični prostorni ugao, sa N':

$$\frac{d^2N_n(\theta,\varphi)}{N_0 d^2\Omega} = N'. \qquad (10.1.27)$$

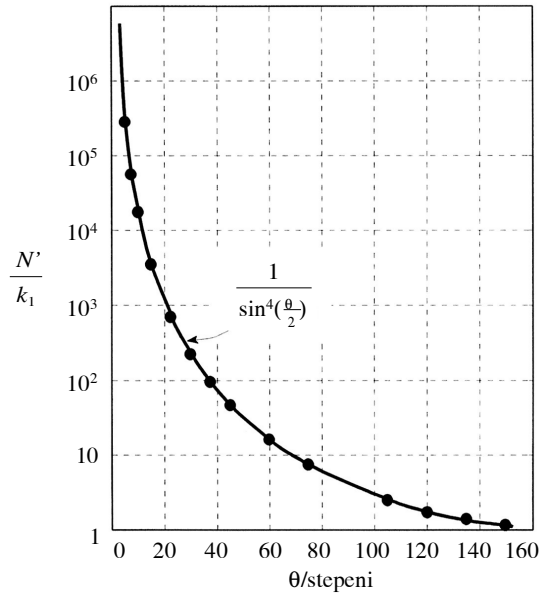
Tada iz jednačine (10.1.26c) za različito podešene uslove dobijamo sledeće jednačine:

a) za metu sa stalnom geometrijom i sastavom:

$$N' = \frac{k_1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \qquad (10.1.28a)$$

odnosno:

$$N' \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right) = const. \tag{10.1.28b}$$



Slika 10.1.5 Grafički prikaz rezultata merenja Gajgera i Marsdena za rasejavanje alfa-čestica na zlatnoj foliji. Normiran broj rasejanih čestica nacrtan je u zavisnosti od ugla rasejavanja, saglasno jednačini (10.1.28a). Puna linija predstavlja teorijsku krivu za rasejavanje u Kulonovom polju.

Mereći broj čestica rasejanih sa zlatne folije pod uglovima od 5° do 150°, Slika 10.1.5, Gajger i Marsden našli su da se izraz $1/\sin^4(\theta/2)$ menja od 2,76 x 10^5 do 1,15, dok se $N' \sin^4(\theta/2)$ menja samo u opsegu od 19 do 30. Time je, u osnovi, potvrđena ispravnost zavisnosti relativnog broja rasejanih čestica od ugla rasejavanja.

Činjenica da izraz (10.1.28b) nije baš sasvim konstantan, ukazuje na to da su pri izvođenju jednačine (10.1.26c) učinjene neke aproksimacije. Najočiglednija se odnosi na mase jezgra i alfa-čestice. Za vreme izvođenja jednačine smatralo se da je masa alfa-čestice zanemarljivo mala u odnosu na masu atomskog jezgra sa kojeg se čestice rasejavaju i da zbog toga ne postoji uzmak jezgra prilikom sudara. Međutim, zbog konačnog odnosa masa, uzmak jezgra postoji i kada se uzme u obzir popravljen izraz (10.1.28b) praktično je konstantan;

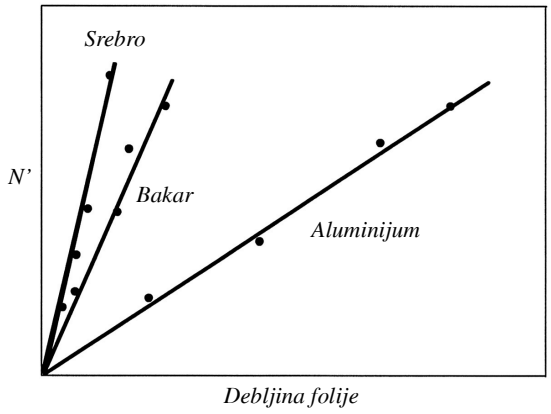
b) za mete istog sastava, a različitih debljina, dobijamo da je:

$$N' = k_2 t \tag{10.1.29a}$$

odnosno:

$$\frac{N'}{t} = const. \tag{10.1.29b}$$

Vršeći rasejavanje na metama različite debljine, Slika 10.1.6, a držeći ugao rasejavanja oko 25°, Gajger i Marsden su našli da je odnos relativnog broja rasejanih čestica i debljine mete stalan, kao što predviđa izraz (10.1.29b). To je istovremeno i dokaz da je, pri umerenim uglovima, rasejavanje u **jednostrukim** sudarima važnije od rasejavanja u **višestrukim** sudarima. Naime, verovatnoća za rasejavanje u višestrukim sudarima proporcionalna je kvadratnom korenu broja rasejavanja u jednostrukim sudarima i tada bi se očekivalo da je $N' \propto \sqrt{t}$. Slika 10.1.6 jasno pokazuje da se to ne događa;



Slika 10.1.6 Zavisnost broja čestica koje su rasejane pod stalnim uglom od debljine metalne folije, za različite metale.

c) za istu metu na kojoj se rasejavaju alfa-čestice različitih energija iz jednačine (10.1.26c) dobijamo:

$$N' = \frac{k_3}{T_0^2} \tag{10.1.30a}$$

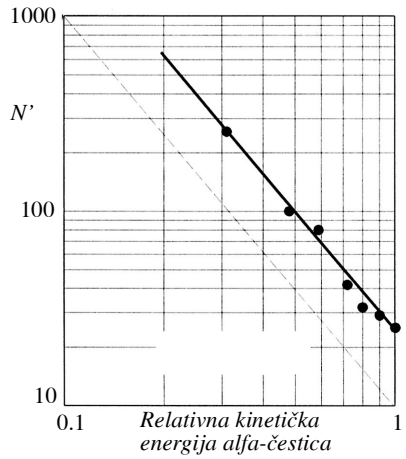
odnosno:

$$N' T_0^2 = const. \tag{10.1.30b}$$

Posmatrajući rasejavanje alfa-čestica različitih energija, Gajger i Marsden potvrdili su valjanost jednačine (10.1.30b), Slika 10.1.7. Alfa-čestice koje emituje radioaktivni izvor oni su usporavali tankim slojem liskuna. Iz nezavisnih merenja znali su uticaj debljine liskuna na brzinu alfa-čestica. Zbog toga su u eksperimentima rasejavanja mogli da menjaju brzinu u širokom opsegu, kao što je pokazano na Slici 10.1.7;

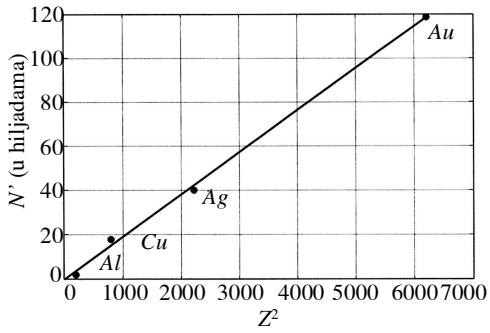
d) za različite mete, pri stalnom broju atoma po jedinici površine ($N_A \rho t / M_A = const.$), važi:

$$N' = k_4 Z^2 . \tag{10.1.31}$$



Slika 10.1.7 Zavisnost broja čestica rasejanih pod odabranim uglom od kinetičke energije alfa-čestica. Uočava se da je skala logaritamska i da nagib od -2 predstavlja zakonitost $N' \propto T_0^{-2}$, kao što predviđa Raderfordova jednačina (10.1.30).

Mereći rasejavanje na folijama različitih metala, Gajger i Marsden potvrdili su da relativni broj rasejanih čestica zavisi od kvadrata naelektrisanja atomskog jezgra, Slika 10.1.8, kao što predviđa poslednja jednačina.



Slika 10.1.8 Zavisnost broja čestica rasejanih pod stalnim uglom od naelektrisanja atomskog jezgra *Z*, za folije od različitih metala, saglasno jednačini (10.1.31). Broj rasejanih čestica nacrtan je u zavisnosti od kvadrata naelektrisanja. Otuda pravolinijska zavisnost kao što sledi iz izraza (10.1.31).

Prema tome, može da se zaključi da je ispravnost Raderfordove jednačine eksperimentalno potvrđena u svim njenim delovima. To podrazumeva i ispravnost svih pretpostavki koje je Raderford učinio, da bi do jednačine došao:

a) interakcija s elektronima ne dovodi do skretanja alfa-čestica pošto je masa elektrona mnogo manja od mase alfa-čestice;

b) centar na kojem dolazi do rasejavanja mora da bude veoma mali pošto najveći broj alfa-čestica prolazi kroz metu bez skretanja. Zbog toga je i verovatnoća da alfa-čestica skrene sa prvobitne putanje, zbog višestrukih sudara, zanemarljivo mala;

c) rasejavanje alfa-čestice posledica je jednostrukog sudara sa vrlo malim pozitivno naelektrisanim atomskim jezgrom.

Gajger i Marsden koristili su alfa-čestice s energijom od 7,68 MeV i zlatne folije debljine oko 3 x 10^{-4} mm. Za ugao rasejavanja od 150° dobijamo da je najmanje

rastojanje između alfa-čestice i atomskog jezgra 30 fm (1 fm = 1 femtometar = 1 Fermi = 10^{-15} m).

Prema tome, eksperimentalno je potvrđeno to da je prečnik atomskog jezgra zlata manji od 30 fm i da Kulonov zakon važi za rastojanja veća od 30 fm.

Primeri

Primer 10.1.1 Snop protona konstantne energije pada normalno na zlatnu foliju debljine 4,0 μm. Od broja upadnih protona jedan deo od $\eta = 1,35 \times 10^{-3}$ raseje se u diferencijalno malom uglu $d\theta$ u pravcu $\theta = 60°$. Izračunati:

a) Kolika je kinetička energija upadnih protona?

b) Diferencijalni efikasni presek $d^2\sigma / d^2\Omega$ atomskog jezgra zlata.

c) Koliki je parametar sudara za protone rasejane pod datim uglom?

REŠENJE:

a) Deo protona rasejanih u kružnom prstenu $d\theta$ pod uglom θ, nalazimo integraljenjem izraza (10.1.26c) po komponenti φ prostornog ugla $d^2\Omega$:

$$\eta(\theta)d\theta = \frac{dN_n(\theta)}{N_0} = \int_{\varphi=0}^{2\pi} \left[\frac{d^2N_n(\theta, \varphi)}{N_0 d^2\Omega}\right] d^2\Omega \cdot \qquad \text{(P-10.1.1)}$$

Imajući na umu da je:

$$d^2\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \qquad \text{(D-10.1.2b)}$$

i da član u uglastoj zagradi jednačine (P-10.1.1.1) ne zavisi od ugla φ, nalazimo izraz koji može da se neposredno integrali:

$$\eta(\theta)d\theta = \int_{\varphi=0}^{2\pi} \left[\frac{d^2N_n(\theta, \varphi)}{N_0 d^2\Omega}\right] \sin\theta \, d\theta \, d\varphi =$$

$$= \left[\frac{d^2N_n(\theta, \varphi)}{N_0 d^2\Omega}\right] \sin\theta \, d\theta \int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi \, .$$

Najzad, integraljenjem i zamenjivanjem:

$$\frac{d^2N_n(\theta, \varphi)}{N_0 d^2\Omega} = \frac{1}{4}\frac{\rho N_A t}{M_A}\left(\frac{zZ}{2T_0}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \qquad \text{(10.1.26c)}$$

dobijamo da je:

$$\eta(\theta) = \pi \frac{\rho N_A t}{M_A} \left(\frac{zZ}{2T_0} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin^3\left(\frac{\theta}{2}\right)} \qquad \text{(P-10.1.2)}$$

ili rešavanjem po T_0:

$$T_0 = \frac{zZ}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right) \sqrt{\frac{\pi\rho N_A t}{M_A \eta(\theta)} \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin^3\left(\frac{\theta}{2}\right)}}. \qquad \text{(P-10.1.3)}$$

Uvrštavanjem brojnih vrednosti: $z = 1$; $Z = 79$; $e^2/(4\pi\varepsilon_0) = 1{,}440$ eV nm; $\rho = 19300$ kg/m^3; $N_A = 6{,}023 \times 10^{23}$/mol; $M_A = 197$ kg/kmol; $t = 4 \times 10^{-6}$ m; $\eta(\theta) = 1{,}35 \times 10^{-3}$ i $\theta = 60°$, nalazimo:

$$T_o = \frac{(1) \times (79)}{2} (1,44 \times 10^{-9} \text{ eVm}) \times$$

$$\times \sqrt{\frac{(3,142)(1,93 \times 10^4 \text{kg/m}^3)(6,023 \times 10^{26}/\text{kmol})(4 \times 10^{-6}\text{m})}{(197\text{kg/kmol})(1,35 \times 10^{-3})} \frac{\cos 30°}{\sin^3 30°}}$$

$$T_0 = 3,509 \text{ MeV}.$$

b) Kombinovanjem izraza:

(10.1.26a) $$\frac{d^2 N_n(\theta, \varphi)}{N_0 d^2\Omega} = nt \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}$$

i:

(10.1.26c) $$\frac{d^2 N_n(\theta, \varphi)}{N_0 d^2\Omega} = \frac{1}{4} nt \left(\frac{zZ}{2T_0} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

nalazimo:

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{1}{4} \left(\frac{zZ}{2T_0} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

i zamenjivanjem brojnih vrednosti:

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{1}{4}\left[\frac{(1)(79)}{2(3,509\times10^6\ \text{eV})}(1,44\times10^{-9}\ \text{eVm})\right]^2\frac{1}{\sin^4(30^\circ)}$$

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = 1,052\times10^{-27}m^2.$$

c) Iz:

(10.1.20) $$p = \frac{1}{2T_0}\left(\frac{zZe^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\text{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

zamenjivanjem brojnih vrednosti nalazimo:

$$p = \frac{1}{2(3,509\times10^6\ \text{eV})}(1,44\times10^{-9}\ \text{eVm})\ \ \text{ctg}(30^\circ)\Rightarrow$$

$$p = 2,81\times10^{-14}\ \text{m}.$$

Primer 10.1.2 Alfa-čestice sa kinetičkom energijom od 8,0 MeV rasejavaju se sa zlatne folije (ρ =19,3 g/cm^3, M_A=197 g/mol) debljine 2,0 x 10^{-4} cm. Koji se deo čestica raseje pod uglom većim od θ =90°?

REŠENJE:

Jednačina (10.1.26c) izražava deo čestica d^2N_r/N_0 rasejanih u prostornom uglu $d^2\Omega$ koji je postavljen u pravcu koji je određen uglovima θ i φ. Deo čestica koje se raseju u svim pravcima φ (od 0 do 2π) nalazimo integraljenjem jednačine (10.1.26c) po φ, kao što je pokazano u primeru 10.1.1:

(P-10.1.2) $$\eta(\theta) = \pi\frac{\rho N_A t}{M_A}\left(\frac{zZ}{2T_0}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin^3\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$ (P-10.1.4)

a između uglova θ_1 i θ_2 integraljenjem ovoga izraza po θ:

$$\eta(\theta_1<\theta<\theta_2) = \pi\frac{\rho N_A t}{M_A}\left(\frac{zZ}{2T_0}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\int_{\theta_1}^{\theta_2}\frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin^3\left(\frac{\theta}{2}\right)}d\theta\cdot$$ (P-10.1.5)

Ovaj integral lako nalazimo ako uočimo da je:

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)d\theta = 2d\left[\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\right]$$

pa je:

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin^3\left(\frac{\theta}{2}\right)} d\theta = 2\int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{d\left[\sin\frac{\theta}{2}\right]}{\sin^3\left(\frac{\theta}{2}\right)} = 2\int_{\sin\left(\frac{\theta_1}{2}\right)}^{\sin\left(\frac{\theta_2}{2}\right)} \frac{dx}{x^3} =$$

$$= -\left[\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta_1}{2}\right)} - \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta_2}{2}\right)}\right]$$

što zamenjivanjem u (P-10.1.5), najzad daje:

$$\eta(\theta_1 < \theta < \theta_2) = \pi \frac{\rho N_A t}{M_A}\left(\frac{zZ}{2T_0}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta_2}{2}\right)} - \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta_1}{2}\right)}\right). \qquad \text{(P-10.1.6)}$$

Pošto je najveća moguća vrednost ugla θ 180°, to ćemo integraljenje da izvršimo u intervalu od 90° do 180°. Zamenjivanjem ostalih brojnih vrednosti: z=1; Z=79; $e^2/4\pi\varepsilon_0$ =1,440 eV nm; ρ =19300 kg/m^3; N_A=6,023 x 10^{23}/mol; M_A= 197 kg/kmol; T_0=8,0 x 10^{6}eV i t = 2 x 10^{-6} m, iz poslednjeg izraza dobijamo:

$$\eta(90° < \theta < 180°) = (3,\,142)\frac{(19300\ \text{kg/m}^3)(6,\,02\times10^{26}/\text{kmol})(2,\,0\times10^{-6}\text{m})}{(197\text{kg/kmol})} \times$$

$$\times \left(\frac{(2)(79)}{2\times(8,\,0\times10^6\text{eV})}(1,\,44\times10^{-9}\text{eVm})\right)^2 \times\left(\frac{1}{\sin^2(90°)} - \frac{1}{\sin^2(45°)}\right) \Rightarrow$$

$$\eta(90° < \theta < 180°) = \frac{N_n(\theta > 90°)}{N_0} = 7,\,47\times10^{-5}.$$

Primer 10.1.3 Naći najmanje rastojanje na koje proton s energijom od 10 MeV u čeonom sudaru može da priđe atomskom jezgru zlata.

REŠENJE:

U čeonom sudaru čestice sa naelektrisanjem ze i energijom T_0 i jezgra sa naelektrisanjem Ze, na nekom najmanjem rastojanju d, brzina čestice jednaka je nuli. Tada je i kinetička energija čestice jednaka nuli. Međutim, kako je pri kretanju u polju centralane sile ukupna energija stalna (D-10.1.10) to je celokupna energija čestice u tom trenutku jednaka njenoj potencijalnoj energiji U_{max}. Dakle:

$$U_{max} = T_0$$

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{zZ}{d} = T_0$$

odakle nalazimo:

$$d = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{zZ}{T_0} \qquad \text{(P-10.1.7)}$$

i zamenjivanjem brojnih vrednosti: $z = 1$; $Z = 79$; $T_0 = 1 \times 10^7$ eV i $e^2/(4\pi\varepsilon_0) = 1{,}440 \times 10^{-9}$ eV m:

$$d = (1,44 \times 10^{-9}\text{eVm})\frac{(1)(79)}{(10^7\text{eV})}$$

$$d = 1,14 \times 10^{-14}\text{m}.$$

Primer 10.1.4 Izračunati najmanje rastojanje na koje alfa-čestica s energijom od 4,0 MeV i sa parametrom sudara $p = 2{,}6 \times 10^{-13}$ m, može da priđe atomskom jezgru zlata.

REŠENJE:

Za česticu sa naelektrisanjem ze, koja se kreće u (Kulonovom) polju centralne sile atomskog jezgra sa naelektrisanjem Ze, održani su moment količine kretanja i ukupna energija, odeljak D-10.1.2. i D-10.1.3. Na beskonačnom rastojanju od jezgra ukupna energije čestice jednaka je njenoj kinetičkoj energiji T_0, a moment količine kretanja jednak je proizvodu mase M, početne brzine υ_0 i parametra sudara p:

(10.1.1a) $$E = T_0 = \frac{1}{2}M\upsilon_0^2$$

(D-10.1.3) $$L = M\upsilon_0 p\,.$$

Kada se čestica primiče jezgru, njena potencijalna energija raste, a zbog zakona održanja, kinetička energije opada. Zbog toga, na najmanjem rastojanju r_{min}, čestica postiže najmanju brzinu υ_{min}. Međutim, pošto energija i moment količine kretanja ostaju očuvani, važi:

(D-10.1.10b) $$\frac{1}{2}M\upsilon_0^2 = \frac{1}{2}M\upsilon_{min}^2 + \frac{zZ}{r_{min}}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right). \qquad \text{(P-10.1.8a)}$$

Jednačina (P-10.7.1) može zgodno da se iskoristi da bi se potencijalna energija izrazila preko početne kinetičke energije T_0 i najmanjeg rastojanja u čeonom sudaru d:

$$\frac{1}{2}M\upsilon_0^2 = \frac{1}{2}M\upsilon_{min}^2 + T_0\left(\frac{d}{r_{min}}\right). \qquad \text{(P-10.1.8b)}$$

Takođe, važi:

$$M\upsilon_0 p = M\upsilon_{min} r_{min}$$

$$\upsilon_{min} = \upsilon_0 \frac{p}{r_{min}}. \tag{P-10.1.9}$$

Zamenjivanjem najmanje brzine iz poslednjeg izraza u (P-10.1.4.1b), dobijamo:

$$T_0 = T_0\left(\frac{p}{r_{min}}\right)^2 + T_0\left(\frac{d}{r_{min}}\right) \tag{P-10.1.10}$$

odakle, skraćivanjem i preuređivanjem, dobijamo kvadratnu jednačinu:

$$\left(\frac{p}{r_{min}}\right)^2 + \left(\frac{d}{r_{min}}\right) - 1 = 0 \tag{P-10.1.11}$$

čije je pozitivno rešenje:

$$r_{min} = \frac{d}{2} + \sqrt{\left(\frac{d}{2}\right)^2 + p^2}. \tag{P-10.1.12}$$

Zamenjivanjem brojnih vrednosti $z = 2$; $Z = 79$; $T_0 = 4{,}0$ MeV; $e^2/(4\pi\varepsilon_0) = 1{,}440 \times 10^{-9}$ eV m i $p = 2{,}6 \times 10^{-13}$ m iz (P-10.1.3.1), nalazimo:

$$d = (1,44 \times 10^{-9}\text{eVm})\frac{(2)(79)}{(4 \times 10^6\ \text{eV})}$$

$$d = 5,69 \times 10^{-14}\ \text{m}$$

a iz (P-10.1.4.5):

$$r_{min} = \frac{5,69 \times 10^{-14}\ \text{m}}{2} + \sqrt{\left(\frac{5,69 \times 10^{-14}\ \text{m}}{2}\right)^2 + (2,60 \times\ \ 10^{-13}\text{m})^2}$$

$$r_{min} = 2,90 \times 10^{-13}\ \text{m}.$$

Zadaci:

1. Izračunati brzinu alfa-čestica čija je kinetička energija 7,68 MeV.

[$\upsilon_0 = 1,93 \times 10^7$ m/s]

2. Aluminijumska folija raseje u izvesnom pravcu u neki prostrani ugao 10^3 čestica u sekundi. Koliko čestica raseje u istom pravcu i prostornom uglu zlatna folija iste debljine?

[36110 čestica/s]

3. Izračunati najmanje rastojaanje na koje protoni sa energijom od a [36110 čestica/s] MeV mogu da priđu atomskom jezgru zlata.

$[d = 1,14 \times 10^{-13}\ \text{m}]$

4. Izračunati kinetičku energiju protona koji u čeonom sudaru mogu da „dodirnu" atomsko jezgro zlata, ako je poluprečnik jezgra 7,6 10^{-15}m.

$[T_0 = 15{,}0\ \text{MeV}]$

5. Pod kojim se uglom alfa-čestica sa energijom od 4 MeV rasejava kada prilazi atomskom jezgru zlata sa parametrom sudara 2,6 x 10^{-13}m?

$[\theta_0 = 12{,}49\ °]$

6. Koliki je parametar sudara za alfa-česticu koja se sa atomskog jezgra zlata rasejava pod uglom od 1°?

$[p = 1{,}7 \times 10^{-12}\ \text{m}]$

7. Izračunati najmanje rastojanje na koje alfa-čestica s energijom od 5,5 MeV, sa parametrom sudara 8,0 x 10^{-15} m, može da priđe atomskom jezgru srebra.

$[r_{min} = 5{,}04 \times 10^{-14}\text{m}]$

8. Ako natrijumova folija (Z = 11, M_A= 23 kg/kmol) raseje u datom pravcu 1,00 x 10^4 alfa-čestica, koliko čestica raseje pod istim uglom:
a) zlatna folija iste debljine; b) duplo tanja natrijumova folija?

$[a) 1{,}25 \times 10^5$; b) $6{,}25 \times 10^4]$

9. Izračunati odnos broja protona i alfa-čestica koji se raseju sa zlatne folije pod uglom $\theta > 90°$, ako oba upadna snopa, snop protona i snop alfa-čestica, imaju jednake fluksove i kinetičke energije upadnih čestica.

[0, 25]

10.2 OSOBINE ATOMSKOG JEZGRA

Iz Raderfordovog i sličnih eksperimenata rasejavanja znamo da je atomsko jezgro veoma malo – oko 10000 puta manje od atoma. Međutim, ono sadrži skoro celokupnu masu atoma. To znači da je gustina nuklearne materije ogromna – oko 2 x 10^{17} kg/m^3. Saglasno Moslijevim rezultatima, odeljak 7.2.6, jezgro sa atomskim brojem Z sadrži Z pozitivnih naelektrisanja. To znači da je i srednja gustina naelektrisanja u nuklearnoj materiji ogromna – oko 10^{25} C/m^3.

Kao što ćemo videti, atomsko jezgro sastoji se od protona i neutrona, koji su vrlo gusto pakovani. Odbojna Kulonova sila između protona raznela bi atomsko jezgro u paramparčad da nema dodatne privlačne sile koja ih drži zajedno. Ta dodatna sila naziva se **nuklearna sila** ili „**jaka**" **sila**. Za dva susedna protona u atomskom jezgru ta sila je 100 puta jača od odbojne Kulonove sile. Jaka sila određuje osobine protona i neutrona u jezgru, na isti način na koji Kulonova sila uslovljava osobine elektrona u atomskom omotaču. Pošto su jake sile mnogo veće i ekscitacione energije nuklearnih stanja su mnogo veće od ekscitacionih energija atomskih stanja. Energetske razlike između atomskih stanja iznose od jedan do nekoliko eV,

dok se energetske razlike između nuklearnih stanja kreću od jednog do nekoliko MeV-a (mega elektronvolti). Prelazi između atomskih stanja dovode do emisije vidljivog ili *x*-zračenja, dok prelazi između nuklearnih stanja dovode do emisije γ zračenja.

Nažalost, nuklearne sile ne mogu da se opišu nekom jednostavnom jednačinom, na primer, jednačinom za Kulonov zakon ili Njutnov zakon gravitacije. Ponašanje ovih sila u zavisnosti od rastojanja poznato je samo u grubim crtama. Zbog toga, stacionarana stanja atomskog jezgra ne mogu da se izračunavaju iz prvih principa, kao što je to moguće za atomska stanja.

10.2.1 Sastav jezgra

Kada se masenim spektrometrom, odeljak 2.3, meri atomska masa hemijski čistog uzorka, dobija se da se čak i hemijski najčistiji uzorak sastoji od smeše atoma različitih atomskih masa.

Atomi koji su hemijski potpuno isti, ali se razlikuju po masama, nazivaju se **izotopima**. Na primer, neon ima dvanaest izotopa: ^{16}Ne, ^{17}Ne, ^{18}Ne, ^{19}Ne, ^{20}Ne, ^{21}Ne, ^{22}Ne, ^{23}Ne, ^{24}Ne, ^{25}Ne, ^{26}Ne, ^{27}Ne, čije se mase kreću od 16,03 do 27,01 a. j. m., Tabela 10.2.1. Broj u gornjem levom uglu hemijskog simbola naziva se **maseni broj**. On je jednak celobrojnoj masi izraženoj u atomskim jedinicama mase ili, još tačnije, maseni broj predstavlja zbir broja protona i broja neutrona u atomskom jezgru. Neon se u prirodi sastoji od smeše izotopa ^{20}Ne (90,92%), Ne (0,257%) i ^{22}Ne (8.825%). Ostali izotopi neona ne javljaju se u prirodi. Oni su vrlo nestabilni i dobijaju se veštački, transmutacijom elemenata u nuklearnim reaktorima ili u akceleratorima. Izotopi ^{20}Ne, i ^{22}Ne, posebno su poznati po tome što su to prvi otkriveni izotopi bilo kojeg hemiskog elementa. Oni su bili identifikovani masenospektrometrijski (J. J. Tomson, 1912) i ubrzo zatim razdvojeni difuzionom metodom (F. W. Aston).

Tabela 10.2.1 Izotopi neona

Izotop	Masa a.j.m.	Broj protona	Broj neutrona	Radioaktivnost
^{16}Ne	16,02575	10	6	p
^{17}Ne	17,01769	10	7	β^+
^{18}Ne	18,00571	10	8	β^+,γ
^{19}Ne	19,00188	10	9	β^+
^{20}Ne	19,99244	10	10	stabilan
^{21}Ne	20,99384	10	11	stabilan
^{22}Ne	21,99138	10	12	stabilan
^{23}Ne	22,99447	10	13	β^-,γ
^{24}Ne	23,99361	10	14	β^-,γ
^{25}Ne	24,99768	10	15	β^-
^{26}Ne	26,00047	10	16	
^{27}Ne	27,00725	10	17	

Svi hemijski elementi imaju po nekoliko izotopa. Vodonik ima tri izotopa: ^{1}H (običan vodonik), ^{2}H (deuterijum) i^{3}H (tricijum). Helijum ima pet izotopa:^{3}He,^{4}He, ^{5}He, ^{6}He, i ^{8}He. Neki od ovih izotopa javljaju se u prirodi – oni su stabilni ili skoro stabilni, sa veoma dugim vremenima poluživota. Drugi mogu da se dobiju samo veštačkim putem – oni su nestabilni i sa vrlo kratkim vremenima poluživota. Pošto su svi atomi datog hemijskog elementa, recimo neona, hemijski potpuno isti, oni moraju da imaju isti broj elektrona u atomskom omotaču. Razlika u masama između izotopa neona, prema tome, mora da potiče od razlika u strukturi njihovih atomskih jezgara. Jezgra su sačinjena od protona i neutrona, Tabela 10.2.2. Svi izotopi neona imaju isti broj protona – deset protona – ali zato imaju raličiti broj neutrona. Tako ^{17}Ne ima sedam neutrona, ^{18}Ne ima osam, ^{19}Ne ima devet, itd. Maseni broj A je zbir broja protona Z i broja neutrona N u atomskom jezgru:

$$A = Z + N. \tag{10.2.1}$$

Protoni i neutroni zajedno nazivaju se nukleoni. Prema tome, A je broj nukleona u atomskom jezgru.

Zanimljivo je uporediti osobine protona i neutrona iz Tabele 10.2.2 sa osobinama elektrona. Najočiglednija razlika je u masi: protoni i neutroni imaju masu oko 1840 puta veću od mase elektrona. Druga značajna razlika odnosi se na unutrašnju stukturu čestica. Nasuprot elektronima koje smatramo tačkastim česticama, protoni i neutroni su sferne čestice malih, ali končanih dimenzija. Poluprečnik protona ili neutrona je oko 1,0 x 10^{-15}m. Kvantni broj spina protona i neutrona iznosi $^{1}/_{2}$, kao i kod elektrona. U Tabeli 10.2.2 navedena je vrednost intenziteta komponente spina duž z-ose s_z. Inače, intenzitet spinskog momenta iznosi $[s(s+1)]^{1/2}\hbar$. Međutim, magnetni moment protona i neutrona mnogo je manji od magnetnog momenta elektrona, saglasno jednačini 5.1.14 $\mu_e = -e\hbar/2m_e$, iz koje se vidi da je magnetni moment obrnuto proporcionalan masi. Kao i kod jednačine za elektron, moglo bi da se očekuje da je magnetni moment protona $e\hbar/2m_p$. Međutim, stvarna vrednost iznosi +2.79 $e\hbar/2m_p$, gde znak plus ukazuje na to da je magnetni moment paralelan spinu. Slično bi moglo da se očekuje i da magnetni moment neutrona bude jednak nuli, zato što je njegovo naelektrisanje nula. Međutim, prava vrednost megnetnog momenta neutrona iznosi –1,91 $e\hbar/2m_p$, gde znak minus ukazuje na antiparalelnu orijentaciju magnetnog momenta i spina. Ove neočekivane vrednosti magnetnog momenta jasno pokazuju da proton i neutron nisu proste čestice sa ujednačenom raspodelom naelektrisanja, već da imaju posebnu unutrašnju strukturu. Magnetne osobine neposredno su uslovljene količinom „rotirajućeg" naelektrisanja. To znači da u neutronu, čije je zbirno naelektrisanje jednako nuli, postoje ljuske pozitivnog i negativnog naelektrisanja čija je radijalna raspodela različita.

Tabela 10.2.2 Nukleoni

Nukleon	Masa /a.j.m.	Spin /$\hbar$	Magnetni moment	Radijus/m
Proton	1,00727647	½	2,792846 $e\hbar/2m_p$	1,0 x10 $^{-15}$
Neutron	1,00866501	½	-1,913042 $e\hbar/2m_p$	1,0 x10 $^{-15}$

Pre nego što je Čedvik otkrio neutron 1932. godine, smatralo se da je atomsko jezgro sastavljeno od protona i elektrona koji su, zapravo, bili jedine čestice poznate u to vreme. Na postojanje elektrona u atomskom jezgru naročito je ukazivao β-raspad pri kojem jezgro izbacuje elektron. (Prema savremenom shvatanju elektron se stvara prilikom raspada.) Saglasno tom shvatanju, na primer, jezgro ^{22}Ne izgrađeno je od 22 protona i 12 elektrona, koji mu daju masu od 22 a.j.m. i nalektrisanje + 10 *e*. Međutim, ovakva slika o građi atomskog jezgra protivrečila je nekim poznatim činjenicama. Na primer, na osnovu spektroskopskih merenja bilo je poznato da atomsko jezgro azota ^{14}Ne ima spin I=1. Prema shvatanju o postojanju nuklearnih elektrona, to jezgro bi trebalo da sadrži 14 protona i 7 elektrona, čiji bi rezultirajući spin trebalo da bude 1/2 ili 3/2 ili 5/2 ili ... 21/2. Druga protivrečnost dolazi od istpitivanja magnetnih osobina atomskih jezgara. Kada bi atomska jezgra sadržavala elektrone, tada bi se očekivalo da njihovi magnetni momenti budu istog reda veličine kao kod elektrona. Međutim, izmereni magnetni momenti obično su manji 1000 puta. Oni su, u stvari, istog reda veličine kao i magnetni momenti protona (Tabela 10.2.2). Još jedan dokaz protiv postojanja nuklearnih elektrona neposredno sledi iz Hajzenbergove relacije neodređenosti. Kada bi elektron bio zatvoren u maloj zapremini koja odgovara dimenzijama atomskog jezgra, $dr \approx 10^{-14}$ m, neodređenost njegovog impulsa dp iznosila bi prema Hajzenbergovoj relaciji:

$$dp\ dr = h$$

a neodređenost energije dE odnosno njoj odgovarajuća razlika između susednih energetskih stanja (s obzirom na vezu između impulsa p i energije čestice E, $p = \sqrt{2mE}$):

$$dE = \frac{h^2}{2 \times m(dr)^2} = \frac{(6,62 \times 10^{-34}\ \mathrm{J}s)^2}{2 \times (9,1 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg}) \times (10^{-14})^2} = 6 \times 10^{-10}\ \mathrm{J} = 1,5 \times 10^{10}\ \mathrm{eV}.$$

(10.2.2)

Ovaj iznos daleko prevazilazi eksperimentalno dobijenu razliku između nuklearnih energetskih stanja koja iznosi od 1 do 10 MeV. Podsetimo se na to da za proton jednačina (10.2.2) daje:

$$dE = \frac{h^2}{2m_p(dr)^2} = \frac{(6,62 \times 10^{-34}\ \mathrm{J}s)^2}{2 \times (1,7 \times 10^{-27}\ \mathrm{kg}) \times (10^{-14})^2} = 2 \times 10^{-6}\ \mathrm{eV} = 2\ \mathrm{MeV}$$

(10.2.3)

što je istog reda veličine kao eksperimentalno određene vrednosti.

Čedvik je otkrio neutrone bombardovanjem berilijuma α-česticama, pri čemu dolazi do reakcije:

$$\alpha + {}^{9}\mathrm{Be} \rightarrow {}^{12}\mathrm{C} + n\,. \tag{10.2.4}$$

I drugi istraživači, pre Čedvika, uočili su da u ovoj reakciji dolazi do pojave „neutralnog" zračenja ali je Čedvik prvi otkrio zračenje i ustanovio njegovu čestičnu prirodu. On je to učinio stavljanjem sloja parafina (ugljovodonika) ili nekog drugog lakog elementa iza berilijumske mete. Neutroni koji nastaju u reakciji, sudaraju se sa lakim jezgrima iz sloja, izbacujući ih. Masu neutrona Čedvik je odredio na osnovu merenja energije izbačenih jezgara.

Otkriće neutrona utrlo je put savremenoj slici o strukturi atomskog jezgra: jezgro se sastoji od Z protona i $(A\text{-}Z)$ neutrona. Ovom slikom atomskog jezgra uklonjene su sve pomenute teškoće. Razvojem snažnih akceleratora, koji mogu da proizvedu snopove visokoenergetskih elektrona ili piona, omogućeno je ispitivanje unutrašnje strukture atomskog jezgra u eksperimentima rasejavanja koji su slični klasičnom Raderfordovom eksperimentu. Takvi eksperimenti dali su neposredan dokaz o postojanju neutrona u atomskom jezgru.

Neutroni su nestabilne čestice. Slobodni neutron sponatano se raspada za oko 15 minuta (srednje vreme života), pretvarajući se u proton uz stvaranje elektrona i antineutrina:

$$n \rightarrow p + e + \tilde{\nu}\,. \tag{10.2.5}$$

Ova reakcija naziva se β^- raspad pošto u njoj dolazi do izbacivanja elektrona ili β^- čestice. Energija (zbirna) izbačenog elektrona i antineutrina iznosi približno 1 MeV. Ovaj spontani raspad neutrona nameće važno pitanje: kako to da su neutroni stabilni u brojnim atomskim jezgrima? Odgovor može da se nađe u okviru Paulijevog principa. U atomskom jezgru, u njegovom osnovnom stanju, najniži energetski nivoi već su popunjeni. Novi proton koji nastaje u reakciji raspada neutrona mora, prema tome, da ode u neko od viših energijskih stanja. U brojnim jezgrima ovaj proton nema dovoljno energije da zaposedne prvo slobodno stanje zbog čega i neutron, sve dok je u jezgru, ostaje stabilan.

10.2.2 Defekt mase

Ako masu atomskog jezgra uporedimo sa zbirom masa njegovih sastojaka, protona i neutrona, vidimo da je masa jezgra manja od zbira protonskih i neutronskih masa. Na primer, jezgro helijuma ima masu od 4,00151 a.j.m, dok zbir masa dva protona i dva neutrona iznosi 2 x (1,00727 a.j.m.) + 2 x (1,00866 a.j.m.) = 4,03186 a.j.m. Masa helijumovog jezgra manja je za 0,03035 a.j.m. Ova razlika naziva se defekt mase. U opštem slučaju:

$$(\text{defekt mase}) = Zm_p + Nm_n - m \tag{10.2.6}$$

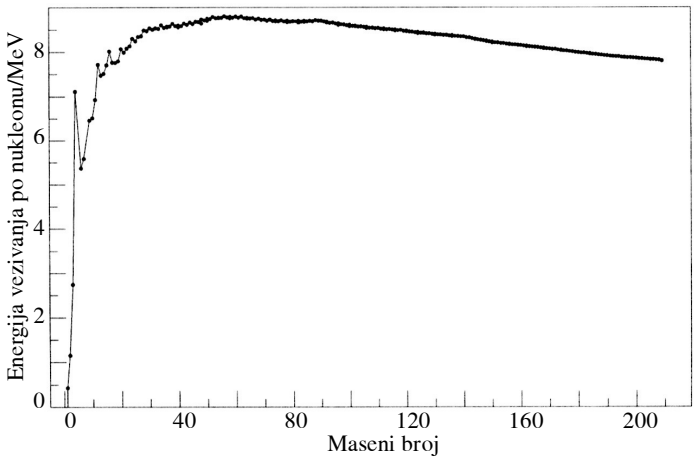
gde je m masa jezgra.

Do pojave defekta mase dolazi zbog oslobađanja energije prilikom izgradnje jezgra iz njegovih sastojaka. Ova energija naziva se **energija vezivanja.** Saglasno

poznatoj Ajnštajnovoj relaciji između mase i energije ($E=mc^2$) koja kaže da svakom iznosu mase m odgovara ekvivalent energije E (i obrnuto), može da se izračuna energija vezivanja B kada je poznat defekt mase Δm:

$$B = (\text{defekt mase})c^2 = (Zm_p + Nm_n - m)c^2 . \qquad (10.2.7)$$

Energija vezivanja težih jezgara obično je veća od energije vezivanja lakših. Da bi energije vezivanja za različita jezgra mogle da se upoređuju, treba da se odredi srednja energija vezivanja po nukleonu, B/A. Kriva na Slici 10.2.1 pokazuje zavisnost srednje energije vezivanja po nukleonu od broja nukleona A, za prirodne izotope. Ona se naziva **krivom energije vezivanja**. Za najveći broj jezgara, srednja energija vezivanja iznosi oko 8 MeV po nukleonu. To je prilično velika energija čiji relativni iznos najlakše možemo da ocenimo ako je uporedimo s energijom mase mirovanja jednog nukleona. Svaki nukleon (proton ili neutron) ima energiju mase mirovanja, mc^2, 1 a.j.m. x c^2= 1,7x10 $^{-27}$ kg x 3 x 10^8 m/s = 1,5 x10^{-10} J=940 MeV. Otuda relativni odnos energije vezivanja i energije mase mirovanja iznosi približno 0,0085, odnosno energija vezivanja je skoro 1% od energije mase mirovanja nukleona. Kriva energije vezivanja ima široki maksimum pri A=56, na mestu jezgra gvožđa. Vrlo laka i vrlo teška jezgra imaju znatno manju energiju vezivanja od energije vezivanja gvožđa. To znači da teška jezgra oslobađaju energiju ako ih razbijemo na dva dela, a takođe i dva laka jezgra ako ih spojimo u jedno. Prvi proces nazivamo **fisija**, a drugi **fuzija**.



Slika 10.2.1 Srednja energija vezivanja po nukleonu u zavisnosti od masenog broja, za prirodne izotope. Tačkama su predstavljene merene enegije; puna linija dobijena je na osnovu modela kapi. Kriva ima maksimum pri A = 56, tj. za ^{56}Fe.

10.2.3 Veličina i oblik atomskog jezgra

Prva određivanja veličine atomskog jezgra potiču još od Raderforda koji je za jezgro aluminijuma procenio poluprečnik na 3 x 10^{-15}m. Od toga doba izveden je

ogroman broj eksperimenata rasejavanja, na osnovu čega je ustanovljeno da je poluprečnik jezgra proporcionalan sa $A^{1/3}$:

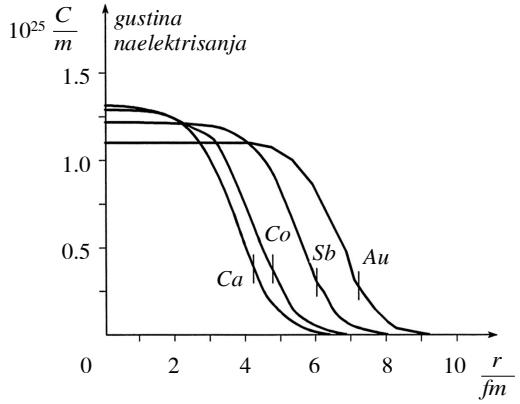
$$R = r_0 A^{1/3} \tag{10.2.8}$$

uz:

$$r_0 = 1,2 \times 10^{-15}\, m \tag{10.2.9}$$

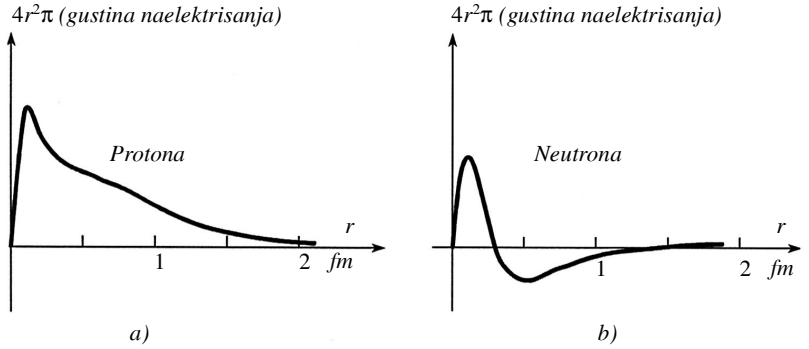
[10^{-15}m = 1 fm (femtometar) = 1 Fermi].

Jednačina (10.2.8) podrazumeva da je zapremina jezgra proporcionalna atomskoj masi A, odakle se neposredno zaključuje da je gustina nuklearne materije stalna – ista za sva jezgra. Najpotpunije eksperimente rasejavanja izveo je pedesetih godina R. Hofštater (Robert Hofstadter, 1915–962, dobio Nobelovu nagradu 1961. godine), sa saradnicima, koristeći visokoenergetske elektrone. Tim eksperimentima oni su odredili nuklearne poluprečnike, ali su, takođe, dobili podatke i o raspodeli naelektrisanja unutar jezgra. Elektroni su vrlo pogodni za ispitivanje gustine naelektrisanja u atomskom jezgru pošto na njih ne deluje polje nuklearnih sila. Elektroni osećaju samo električno delovanje protona i prilično lako prodiru kroz atomsko jezgro. Na Slici 10.2.2 prikazana je raspodela naelektrisanja u zavisnosti od radijalnog rastojanja za neka atomska jezgra. Sa slike vidimo da površina atomskog jezgra nije strogo određena – gustina naelektrisanja postepeno se približava nuli. Zbog toga je i pojam nuklearnog poluprečnika, određen jednačinom (10.2.8), donekle nejasan.



Slika 10.2.2 Zavisnost gustine naelektrisanja od poluprečnika za nekoliko atomskih jezgara, na osnovu rasejavanja elektrona. Za svako jezgro, poluprečnik $R = r_0 A^{1/3}$ označen je vertikalnom crticom.

Raspodela naelektrisanja unutar jednog protona ili neutrona, takođe, je ispitivana i na osnovu rasejavanja elektrona. Na Slici 10.2.3 prikazane su raspodele naelektrisanja unutar protona i neutrona dobijene iz tih eksperimenata. Gustina naelektrisanja protona opada sa rastojanjem, grubo rečeno, eksponencijalno (približno sa $e^{-r/a}$, uz $a \approx 0,23 \times 10^{-15}$ m) . Kod neutrona, unutrašnji sloj pozitivnog naelektrisanja okružen je slojem negativnog naelektrisanja, a ovaj još jednim slojem slabog pozitivnog naelektrisanja. Ukupno naelektrisanje neutrona, naravno, jednako je nuli. Treba da se uoči to da se gustina naelektrisanja za obe čestice proteže nešto preko nominalnog poluprečnika R = 1,0 x 10^{-15}m koji je dat u Tabeli 10.2.2.



Slika 10.2.3 Radijalna funkcija raspodele naelektrisanja: a) za proton; b) za neutron.

Nekoliko drugih metoda za određivanje poluprečnika atomskog jezgra daju rezultate koji su uporedivi sa predviđanjima jednačine (10.2.8). Jedna od takvih metoda zasniva se na **izotopskom pomaku** spektralnih linija atoma. Raspodela nuklearnog naelektrisanja dovodi do pojave (malog) pomaka elektronskih nivoa u atomu, zbog toga što se elektrostatički potencijal unutar atomskog jezgra razlikuje od potencijala tačkastog naelektrisanja. Pošto jezgra i njihova raspodela naelektrisanja kod različitih izotopa imaju različite veličine, oni dovode do različitog pomaka. Zbog toga spektralne linije izotopa pokazuju (merljive) relativne pomake. Veličina atomskog jezgra može da se odredi iz tih spektralnih pomaka. Slična metoda može da se primeni kod izotopskih pomaka energetskih nivoa mionskih atoma tj. kod atoma u kojima se mion kreće oko jezgra. Mion je čestica istog naelektrisanja i spina kao i elektron, samo sa masom 207 puta većom od mase elektrona. (Mioni se lako dobijaju u relacijama koje se odigravaju prilikom udara u metu elementarne čestice koja je ubrzana u akceleratoru čestica.) Izotopski pomaci mionskih energetskih nivoa mnogo su veći nego oni kod elektronskih energijskih nivoa, što je posledica veće mase miona. Orbita miona je 207 puta manja od orbite elektrona, pa je mnogo osetljivija na male promene raspodele nuklearnog naelektrisanja.

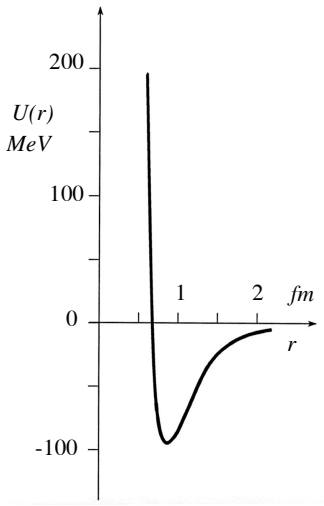
10.2.4 Sile u jezgru – jaka sila

Pošto se protoni u jezgru nalaze na međusobno vrlo malom rastojanju, odbojna Kulonova sila koja deluje između njih je ogromna. Da bi se jezgro održalo u ravnoteži, ta sila treba da se uravnoteži dodatnom privlačnom silom, koja je poznata kao **nuklearna sila** ili **jaka** sila. Nuklearna sila je mnogo jača od Kulonove. Na primer, za dva protona čiji su centri na rastojanju od 2 fm, odbojna Kulonova sila je 60 N, dok je privlačna jaka sila približno 2 x 10^3N. Međutim, jaka sila je jaka samo u ograničenom prostoru. Na rastojanjima iznad 3 fm jaka sila brzo iščezava.

Važna osobina jake sile jeste njena **nezavisnost od naelektrisanja**. Sila između dva nukleona ne zavisi od toga da li su to dva protona, dva neutrona ili su to proton i neutron. (Prema nedavnim eksperimentalnim nalazima, jaka sila nije baš potpuno nezavisna od naelektrisanja. Međutim, deo koji zavisi od naelektrisanja vrlo je mali, manji je od 1% i obično može da se zanemari.) Druga važna osobina jake sile jeste da ona **zavisi od spina**. Sila između dva nukleona sa paralelnim spinovima jača je nego sila između nukleona s antiparalelnim spinovima.

Nasuprot Kulonovoj sili koja zavisi po zakonu $1/r^2$ od rastojanja, jaka sila zavisi od rastojanja između nukleona na vrlo složen način. U stvari, tačna teorijska jednačina koja daje zavisnost jake sile od rastojanja nije poznata, mada postoji nekoliko (vrlo složenih) približnih izraza. Zbog toga se ovde zavisnost jake sile od rastojanja samo kvalitativno razmatra. Sila se obično opisuje njenim potencijalom zato što je to veličina koja ulazi u Šredingerovu jednačinu. Na Slici 10.2.4 pokazana je zavisnost potencijala jake sile od rastojanja za dva nukleona s antiparalelnim spinovima i nultim orbitnim ugaonim momentom. Sila je jako privlačna u području 1–2 fm, a postaje odbojna na rastojanjima kraćim od 0,8 fm, gde nukleoni počinju da prodiru jedan u drugoga. Opadanje (po apsolutnoj vrednosti) potencijala ka nuli za rastojanja iznad 2 fm, opisuje se eksponencijalnom funkcijom koja je poznata kao Jukavin potencijal:

$$U(r) \approx -10,46 \frac{e^{-r/b}}{r/b} \text{ MeV} \qquad (10.2.10)$$



Slika 10.2.4 Potencijal jake sile za dva nukleona sa antiparalelnim spinovima i nultim orbitnim ugaonim momentom ($^1S_0$ stanje) u zavisnosti od rastojanja.

uz $b \approx 1,43$ fm. Zbog eksponencijalne zavisnosti, potencijal i sila vrlo brzo teže nuli sa porastom rastojanja. Otuda, nukleoni na jednom kraju jezgra, recimo urana, neposredno ne osećaju jaku silu nukleona sa drugog kraja istog jezgra. Isto tako, nukleoni iz jednog jezgra nikada ne osećaju jaku silu nukleona iz drugog atoma, osim ako se dva jezgra ne dovedu u neposredan dodir sudarom.

Jaka sila je "many-body" sila, što znači da sila između dva nukleona u jezgru zavisi i od položaja svih susednih nukleona. Zbog toga za nuklearne sile ne važi princip **slaganja**. Vektorskim sabiranjem sila kojima svaki pojedini nukleon deluje na posmatrani nukleon, **ne može** da se izračuna ukupna sila koja deluje na taj nukleon. Umesto toga, kada se izračunava sila kojom susedni nukleon deluje na posmatrani nukleon, treba da se uzme u obzir i to da je njihovo međudejstvo izmenjeno prisustvom ostalih nukleona. Ta osobima jake sile čini izračunavanje međudejstava između nekoliko nukleona izuzetno teškim.

10.3 MODELI JEZGRA

Zbog nedovoljnog poznavanja prirode nuklearnih sila, atomsko jezgro opisuje se različitim **modelima**, kao što su model kapi ili model ljuske. Takvi modeli su iskrivljena slika stvarnog jezgra. Oni su samo grube teorijske slike koje uključuju neke delove stvarnosti i objašnjavaju samo neke manifestacije nuklearne strukture, ali ne daju potpunu sliku i strogi opis svih osobina atomskog jezgra.

10.3.1 Model kapi

Jaka sila između nukleona donekle je slična silama koje deluju između molekula. Obe sile su privlačne u ograničenom području i postaju veoma odbojne kada se

molekuli ili nukleoni dovedu u neposredan dodir tako da se uzajamno prožimaju. Zbog takve sličnosti može da se očekuje da će agregacija velikog broja nukleona da ima slične osobine kao i agregacija velikog broja molekula, tj. tečnost (upoređivanje sa čvrstim stanjem koje, takođe, predstavlja agregaciju velikog broja molekula, zbog razloga koje ovde nećemo da navodimo, uopšte nije pogodno). Jake odbojne sile pri malim rastojanjima čine nuklearni „fluid" skoro nestišljivim, dok privlačenje kratkog dometa predstavlja kohezionu silu koja drži fluid zajedno. Ravnoteža između privlačnih i odbojnih sila održava nukleone na međusobno stalnim rastojanjima, čime i fluid dobija konačnu i stalnu gustinu. Time može da se kvalitativno objasni stalna gustina nuklearne materije.

Model kapi za atomsko jezgro koristi sličnost između tečnosti i nuklearne materije. Po ovom modelu atomsko jezgro predstavlja se kao kapljica nuklearnog fluida. Osobine jezgra objašnjavaju se na osnovu kolektivnih osobina nuklearnog fluida, uz potpuno zanemarivanje pojedinačnih osobina nukleona. Na primer, sferni oblik atomskog jezgra objašnjava se na sledeći način: svaki nukleon na površini kapljice nuklearnog fluida nalazi se pod uticajem sile kojom na njega deluju nukleoni iz unutrašnjosti kapljice. Ta sila vuče nukleone sa površine kapi u njenu unutrašnjost. Zbog toga površina kapljice spontano teži ka najmanjoj vrednosti za datu (stalnu) zapreminu kapi. Ovakva pojava dobro je poznata kod tečnosti. Sila koja svojim delovanjem smanjuje površinu kapi tečnosti naziva se **površinski napon**. Slično tome, za nuklearnu kap govorimo o nuklearnom površinskom naponu. Pošto sfera kao geometrijsko telo ima najmanju površinu, pri datoj zapremini, kapljica tečnosti (ako na nju ne deluju dodatne spoljašne sile) imaće sferni oblik.

Na osnovu modela kapi mogu da se izvedu jednostavne približne jednačine za zavisnost energije vezivanja od masenog i rednog broja elementa, koja je grafički prikazana na Slici 10.2.1. Ta jednačina sastoji se od nekoliko članova koje ćemo pojedinačno opisati. Najvažniji član u energiji vezivanja potiče od veze koja se stvara između svakog nukleona i njegovih suseda. Pošto nuklearne sile brzo opadaju sa rastojanjem, njihovo delovanje ograničeno je na najbliže susede. Broj neposrednih suseda za svaki nukleon je stalan, pa je stalna i sila vezivanja po jednom nukleonu. Ukupna energija vezivanja proporcionalna je broju veza. Pošto svaki nukleon ima približno isti i stalni broj veza, ukupni broj veza u jezgru proporcionalan je broju nukleona.

Zbog toga, energija vezivanja mora da sadrži član:

$$a_1 A \tag{10.3.1}$$

gde je a_1 (pozitivna) konstanta čija vrednost može da se dobije upoređivanjem sa eksperimentalnim vrednostima. Međutim, ovaj član ne uzima u obzir činjenicu da nukleoni na površini atomskog jezgra imaju manje suseda od nukleona u unutrašnjosti jezgra. Prema tome član (10.3.1) mora da se popravi za umanjeni broj suseda nukleona na površini atomskog jezgra. Broj nukleona na površini proporcionalan je veličini površine $4\pi R^2$. Pošto je $R^2 \approx A^{2/3}$, jednačina (10.2.8), popravka gornjeg člana, ima oblik:

$$-a_2 A^{2/3} \tag{10.3.2}$$

gde je a_2 druga (pozitivna) konstanta. Negativni znak u izrazu (10.3.2) ukazuje na to da ovaj član **smanjuje** energiju vezivanja. Sledeće međudejstvo koje treba da se ima na umu, a koje utiče na stabilnost jezgra, jeste elektrostatičko odbijanje između protona od kojih je izgrađeno atomsko jezgro. Ako se jezgro sastoji od Z protona, onda je njegovo ukupno naelektrisanje $Q = Ze$. Da bi se problem pojednostavio (razmatra se kolektivni model) podrazumeva se da je naelektrisanje ravnomerno raspoređeno po zapremini jezgra. Zbog toga može da se iskoristi poznata jednačina iz elektrostatike kojom se izražava elektrostatička potencijalna energija ravnomerno naelektrisane sfere:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{3}{5}\frac{Q^2}{R} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{3}{5}\frac{Z^2e^2}{A^{1/3}\cdot 1,2\times 10^{-15}} = \frac{Z^2}{A^{1/2}}\times 1,14\times 10^{-13}\text{J}. \quad (10.3.3a)$$

Poslednji izraz može da se prevede u elektronvolte (1 MeV = 1.60×10^{-13} J), pa doprinos elektrostatičke potencijalne energije energiji vezivanja može da se opiše izrazom:

$$-\frac{Z^2}{A^{1/3}}\cdot 0,710\ \text{MeV} \quad (10.3.3b)$$

gde je dodat i negativni znak kojim se označava da elektrostatičko međudejstvo **slabi** energiju vezivanja. Pošto vrednost za poluprečnik atomskog jezgra koja je korišćena za izračunavanje brojčanog koeficijenta nije baš pouzdana, mnogo je sigurnije da se isti izraz napiše u uopštenom obliku:

$$-a_3\cdot\frac{Z^2}{A^{1/3}} \quad (10.3.3c)$$

gde je a_3 konstanta čija se vrednost podešava na osnovu eksperimentalnih vrednosti za energiju vezivanja različitih jezgara.

Na kraju, treba da se uzme u obzir i kvantnomehanička popravka. Protoni i neutroni su fermioni i zbog toga se pokoravaju principu isključenja. To znači da protoni i neutroni imaju sopstvene nizove energetskih stanja. Protonska i neutronska stanja energetski su skoro jednaka. Razlikuju se (neznatno) samo za dodatno Kulonovo međudejstvo između protona. U atomskom jezgru sa Z protona i $(A - Z)$ neutrona, protoni zauzimaju najnižih Z protonskih stanja, a neutroni $(A - Z)$ najnižih neutronskih stanja. Ako jezgro sa masenim brojem A ima jednak broj protona i neutrona ($Z = A/2$, $N = A - Z = A/2$), tada su protonska i neutronska stanja popunjena do istog energijskog nivoa. Dodavanjem nove čestice popuniće se prvi naredni nivo iz odgovarajućeg skupa energijskih nivoa. Međutim, pošto su i protonski i neutronski nivoi ispunjeni u istom iznosu, energijski gledano sasvim je svejedno da li je nova čestica proton ili neutron, jer novo dostupno stanje ima istu energiju bez obzira na vrstu čestice. Ako jezgro ima različit broj protona i neutrona (recimo, $Z = A/2 + 3$ i $N = A/2 - 3$), situacija se očigledno menja. I ovde su najniži protonski i neutronski nivoi popunjeni. Međutim, kako u jezgru postoji višak protona, energijski nivo koji zauzima poslednji proton nalazi se iznad poslednjeg popunjenog neutronskog nivoa. To znači da prvi dostupni protonski nivo leži iznad prvog dostupnog

neutronskog nivoa, odnosno da dovođenje novog protona čini jezgro nestabilnijim nego dovođenje novog neutrona. Drugim rečima, jezgro „asimetrično" u sadržaju protona i neutrona ima veću energiju nego jezgro sa „simetričnim" sadržajem protona i neutrona. Pošto višak protona dovodi do iste pojave kao i višak neutrona, porast energije jezgra mora da bude parna funkcija razlike broja protona i broja neutrona. Taj porast energije mora da se izrazi stepenim redom sa parnim stepenima od $(N - Z)$ odnosno $(A - 2Z)$. Ako zadržimo samo prvi član stepenog reda, dobijamo da je porast energije proporcionalan sa $(A - 2Z)^2$. Takav izraz daje zadovoljavajući opis porasta energije pri stalnoj vrednosti A. Međutim, pre nego što ukupnoj energiji vezivanja dodamo član $(A - 2Z)^2$, treba još da ga popravimo za njegovu zavisnost od A. Porast energije do kojeg dolazi zbog viška protona ili neutrona sve je manji sa porastom masenog broja A. Do toga dolazi zato što pri velikim A vrednostima odgovarajući energijski nivoi imaju velike kvantne brojeve tako da relativna energijska razlika (Δ) između njih opada. Pošto je $n \approx A$, porast energije obrnuto je proporcionalan masenom broju A tako da za popravku najzad dobijamo:

$$-\frac{a_4}{4} \cdot \frac{(A - 2Z)^2}{A}. \tag{10.3.4}$$

Kao i do sada a_4 jeste empirijska konstanta, znak minus označava da porast energije jezgra zapravo smanjuje u njemu energiju vezivanja, a faktor 4 uveden je zbog pogodnosti. Izraz (10.3.4) obično se naziva **energija asimetrije.**

Ukupna energija vezivanja jezgra je zbir izraza (10.3.1), (10.3.2), (10.3.3c) i (10.3.4) (postoji još jedan član – **energija sparivanja,** koji uzima u obzir empirijsku činjenicu da su jezgra sa parnim brojem protona i parnim brojem neutrona stabilnija od parno-neparnih i neparno-neparnih jezgara; međutim, njegova vrednost je prilično mala i ne može da se teorijski opravda jednostavnim dokazima):

$$B = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_4 \frac{(A/2 - Z)^2}{A}. \tag{10.3.5}$$

Vrednosti konstanti a_1, a_2, a_3 i a_4 moraju da se odrede iz eksperimentalnih podataka. Podešavanjem konstanti tako da se dobije najbolje slaganje navedene jednačine sa eksperimentalnim podacima za energiju vezivanja, dobijaju se sledeće vrednosti:

$$a_1 = 15{,}753 \text{ MeV} \tag{10.3.6a}$$

$$a_2 = 17{,}804 \text{ MeV} \tag{10.3.6b}$$

$$a_3 = 0{,}7103 \text{ MeV} \tag{10.3.6c}$$

$$a_4 = 94{,}77 \text{ MeV}. \tag{10.3.6d}$$

Zamenjivanjem ovih vrednosti, dobijamo konačno izraz koji je poznat kao Vajczekerova (Carl Friedrich von Weizsäcker, rođen 1912), **poluempirijska jednačina** za energiju vezivanja:

$$B = \left\{ 15,753\,A - 17,804\,A^{2/3} - 0,7103 \cdot \frac{Z^2}{A^{1/3}} - 94,77 \cdot \frac{(A/2 - Z^2)^2}{A} \right\} . \qquad (10.3.7)$$

Jednačina je u opštim crtama izvedena na osnovu teorijskih razmatranja, ali su konstante dobijene iz empirijskih podataka.

Zbog toga što se energije vezivanja obično izračunavaju na osnovu defekta mase, korisno je da se jednačina (10.3.7) prevede u masene jedinice. Nuklearna energija vezivanja B povezana je sa defektom mase Δm poznatim izrazom $\Delta m = B/c^2$. Otuda masa jezgra sa Z protona i $(A - Z)$ neutrona iznosi $Zm_p + (A - Z)m_n - -B/c^2$. Pošto masene tabele obično prikazuju atomske mase izotopa (a ne nuklearne mase), pogodno je da se ovome izrazu dodaju mase Z elektrona. Zbir $(Zm_p + Zm_e)$ jednak je Zm_H. Otud, poluempirijska jednačina za masu izotopa ima oblik:

$$M = Zm_H + (A - Z)m_n - (B/c^2). \qquad (10.3.8)$$

Zamenjivanjem vrednosti $m_H = 1,007825$ a.j.m., $m_n = 1,008665$ a.j.m. i 1 MeV/c^2 = (1/931,502) a.j.m., dobijamo:

$$M = 1,008665 - 0,000840\,Z - \{0,016911\,A - 0,0191113\,A^{2/3} - 0,0007625\frac{Z^2}{A^{1/3}} - 0,10174\,\frac{(A/2 - Z)^2}{A}\} . \qquad (10.3.9)$$

Puna linija na Slici 10.2.1 predstavlja zavisnost energije vezivanja po jednom nukleonu B/A, dobijenu iz jednačine (10.3.7). Vrednosti A i Z koje su korišćene za izračunavanje izraza (10.3.7) uzete su iz tabele stabilnih izotopa. Tačke na Slici 10.2.1 predstavljaju stvarno opažene vrednosti energije vezivanja. Izuzev za jezgra sa malim atomskim masama, za koja se i ne očekuje valjanost modela kapi (broj nukleona suviše je mali da bi se stvorila ujednačena kapljica), slaganje jednačine s eksperimentalnim vrednostima je izvanredno.

Široki maksimum krive energije vezivanja u okolini $A = 56$ potiče od kombinovanih uticaja površinske energije [drugi član u jednačini (10.3.7)] i elektrostatičke energije (treći član). Kod lakih jezgara (malo A i malo Z) značajni deo nukleona nalazi se na površini jezgra, pa i površinska energija čini značajni deo ukupne energije vezivanja. Kako se površinska energija u jednačini (10.3.7) javlja sa negativnim znakom, to je i ukupna energija vezivanja mala. Kod teških jezgara (velike vrednosti A i Z) elektrostatička energija čini značajan deo energije vezivanja. Pošto i ova energija ulazi u jednačinu (10.3.7) sa negativnim znakom, ona dovodi do sniženja ukupne energije vezivanja. Atomska jezgra sa vrednostima A i Z u sredini njihovog opsega imaju relativno malu površinsku energiju, a takođe i malu elektrostatičku energiju. Zbog toga jezgra srednje veličine imaju najveće vrednosti energije vezivanja po nukleonu.

Vidi se da je elektrostatička energija proporcionalna sa Z^2. To znači da bi sa porastom Z, pri stalnom A, energija vezivanja postala negativna, tj. jezgro bi postalo nestabilno i raspalo bi se pod odbojnim uticajem Kulonove sile. Zbog toga jezgro sa velikim naelektrisanjem Z može da zadrži celovitost samo ako mu poraste maseni broj A, tako da se prvim članom u jednačini (10.3.7) kompenzuje treći član jed-

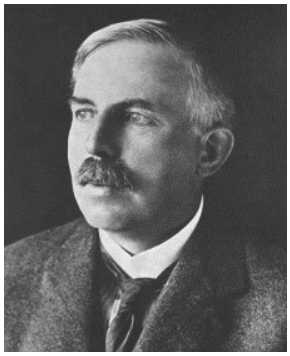
načine. Velika vrednost masenog broja postiže se porastom broja neutrona u jezgru. Na primer, ^{238}U ima 146 neutrona i svega 92 protona.

Prisustvo neutrona je neophodno da bi se smanjila koncentracija protona u nuklearnom fluidu i time smanjio uticaj Kulonovog odbijanja. Slučaj jezgra ^{238}U tipičan je za sva teška jezgra: prisustvo ogromnog viška neutrona neophodno je za održavanje njihove stabilnosti. U lakšim jezgrima Kulonovo odbijanje je manje izraženo i zbog toga njima nije neophodan višak neutrona da bi očuvala svoju stabilnost.

Za kvantitativno razmatranje zastupljenosti protona i neutrona posmatraćemo jezgra sa istim masenim brojem A, ali sa različitim rednim brojevima Z. (Takva jezgra nazivaju se **izobari**.) Ako neko od tih jezgara ima previše neutrona, tada je pretvaranje neutrona u proton energijski povoljno i događa se tzv. β^- raspad. Nasuprot tome, ako jezgro ima višak protona javlja se pretvaranje protona u neutron, odnosno β^+ raspad. U nekim slučajevima kod nestabilnih jezgara javlja se K-zahvat.

Stabilna jezgra imaju najpovoljniji broj protona i neutrona za određenu vrednost masenog broja A. Ovaj najpovoljniji broj može da se izračuna ako se nađe vrednost rednog broja Z_{opt} za koju funkcija energije veze B ima ekstremnu vrednost. Matematički, ovo znači da treba da se potraži prvi izvod funkcije $B(Z)$ po Z i da se izjednači sa nulom. Tako može da se nađe i najstabilnije izobarno jezgro, o čemu će detaljnije biti reči u poglavlju 11.

Hideki Jukava (Hideki Yukawa, 1907–1981), rođen je u Tokiju, a doktorirao je na univerzitetu u Osaki. Da bi objasnio stabilnost atomskog jezgra 1935. godine uveo je pojam novih, nuklearnih sila. Opisao je osobine nove čestice koja je prenosilac te sile, a čija je masa između mase elektrona i mase protona. Ova Jukavina hipoteza potvrđena je otkrićem nove čestice, P-mezona. Jukava je dobio Nobelovu nagradu za fiziku 1949. godine za predviđanje postojanja mezona na osnovu teorijskog rada na nuklearnim silama.



Lord Ernest Raderford (Lord Ernest Rutherford, 1871–1937), rođen je na Novom Zelandu, a istraživačku karijeru započeo je kao saradnik Dž. Dž. Tomsona u Kembridžu, u Kevendiškoj laboratoriji. U periodu od 1898. do 1907. bio je profesor na Mek-Gil univerzitetu u Kanadi, a u periodu od 1907. do 1919. direktor fizičke laboratorije. Raderford 1919. godine prihvata poziv iz Kembridža i dolazi na mesto J. J. Tomsona kao profesor fizike pri Kevendiškoj laboratoriji. U svom naučnom radu bavio se ispitivanjem radioaktivnosti, otkrio novi izotop radona, a sa F. Sodijem (Frederic Soddy) postavio je zakon radioaktivnog raspada, pa je 1908. godine nagrađen Nobelovom nagradom za hemiju za „ispitivanje dezintegracije elemenata i hemije radioaktivnih supstancija". Tokom 1910. godine Raderford radi na ispitivanju rasejavanja alfa-čestica na atomima, posle čega izvodi čuvenu formulu koja za osnovnu pretpostavku uzima postojanje pozitivno naelektrisanog jezgra atoma sićušnog po zapremini u odnosu na ukupnu zapreminu atoma, postavaljajući na taj način teoriju strukture atoma.

11. RASPAD ATOMSKOG JEZGRA – RADIOAKTIVNOST

11.1 RASPAD JEZGRA: ENERGIJSKI BILANS I RASPAD KAO STATISTIČKA POJAVA

Jezgra nekih atoma, posle konačnog vremena postojanja, spontano emitujući jednu ili više čestica ili kvanata elektromagnetnog zračenja, preobražavaju se u druga jezgra. Ova pojava „raspada" jezgra naziva se radioaktivnost, a jezgra koja emituju čestice ili zračenje označavaju se kao radioaktivna. Raspadom početnog jezgra, koje se obično naziva jezgro roditelj, nastaje novo jezgro ili jezgro potomak, koje može da ima drugi atomski (redni) broj Z i/ili maseni broj A u odnosu na jezgro roditelja. Radioaktivni raspad odlikuje se vrstom i energijom emitovanih čestica i vremenom poluraspada. Kada jezgro napuštaju dve ili više čestica, određen je i ugao između pravaca emisije čestica. U prirodi se javljaju α-raspad, β^--raspad i γ-raspad. Pri α-raspadu radioaktivna jezgra emituju jezgra helijumovih atoma $({}_2He^4)^{++}$. Kod β^- raspada, iz jezgra se emituju elektron i čestica antineutrino, a kod γ emisije jezgro zrači elektromagnetno zračenje velike energije. U laboratoriji mogu da se dobiju i jezgra koja se raspadaju emitujući pozitrone i neutrina (β^+-raspad) ili koja pokazuju K-zahvat.

Prirodnu radioaktivnost otkrio je krajem prošlog veka francuski naučnik Anri Bekerel (Henri Antonio Becquerel). Trudeći se da ustanovi uzrok flurosecencije odnosno fosforescencije[19] nekih materijala (što je i njegov otac, takođe fizičar, proučavao), Anri Bekerel je na fotografsku ploču umotanu u crni papir postavio kristal uranijumove soli i onda sve izložio Sunčevoj svetlosti. Posle izvesnog vremena razvio je fotografsku ploču i ustanovio da je ona bila „osvetljena", što je značilo da je uranijumova so emitovala zračenje koje je moglo da prođe kroz papir i da dejstvuje na fotografsku ploču. U početku, Bekerel je smatrao da uranijumova so zrači pod dejstvom Sunčeve svetlosti. A onda je, jednog oblačnog dana odustajući od eksperimenta, fotoploču umotanu u crni papir, sa kristalima uranijumove soli postavljene odozgo, stavio u ormar. Posle nekoliko dana, ploču je ipak razvio, konstatujući, sa velikim iznenađenjem, da je ona jako ozračena. Zaključio je da uranijumova so, bez

[19] Aspsorpcijom kvanata elektromagnetnog zračenja atom ili molekul se pobuđuje. Zračenje tako pobuđenog atoma ili molekula naziva se fluorescencija. Može da se dogodi da prelaz molekula (u stanje niže energije) bude delimično zabranjen. Tada je intenzitet zračenja mali ali zračenje duže traje i tada se govori o fosforescenciji.

spoljnjeg uticaja, emituje zračenje koje prolazi kroz hartiju i izaziva zacrnjenje foto ploče. Ovu pojavu je Marija Kiri nazvala **radioaktivnost**. Proučavanje radioaktivnosti veoma je uticalo na rasvetljavanje strukture atoma (podsećamo na ogled rasejavanja α -čestice na tankoj foliji, odeljak 10.1.1). Ispitujući zajedno s Pjerom Kirijem radioaktivnost i drugih uranijumovih jedinjenja, npr. rude *pehblende* (koja se uglavnom sastoji od U_3O - uranil oksid), M. Kiri je utvrdila da je zračenje pehblende mnogo jače i da nije proporcionalno količini urana prisutnog u njoj. Pretpostavila je da ruda pehblende sadrži u sebi i malu količinu nekog elementa koji mnogo jače zrači. Korišćenjem običnih hemijskih postupaka za razdvajanje elemenata, P. i M. Kiri izolovali su dve takve supstancije. Jedan od izolovanih elemenata, taložen kao sulfid bizmut sulfidom, nazvan je *polonijum*, u čast Poljske, odakle je Marija Kiri bila poreklom. Drugi element, *radijum,* izolovan je posle dugog i strpljivog rada sa stotinama kilograma ostatka rude pehblende iz koje je već bio eliminisan uran. Izdvojene su najpre male količine radijuma u obliku radijum-hlorida, a 1910. godine elektrolizom ovog rastvora dobijen je čist radijum. Otprilike u isto vreme M. Kiri i G. Šmit (G. C. Schmidt) nalaze, nezavisno jedno od drugog, da su i torijumova jedinjenja radioaktivna. Ubrzo i A. Debijern (A. Debierne) i F. Gizel (F. Giesel) u uranovim mineralima dokazuju prisustvo novog radioaktivnog elementa–*aktinijuma.* Posle ovih prvih otkrića, sistematskim ispitivanjima, otkriveno je to da u prirodi postoji četrdesetak elemenata koji potpuno sponatano emituju radioaktivno zračenje.

Emitovano radioaktivno zračenje prodire kroz različite materijale, a takođe može i da jonizuje sredinu kroz koju prolazi. Proučavajući prodornu moć zračenja koja emituje uran, Raderford je utvrdio da postoje dve vrste zračenja (α i β). α-zračenje lakše se apsorbuje od β ali više jonizuje sredinu kroz koju prolazi. α i β-zraci različito skreću u magnetnom polju, na osnovu čega je zaključeno da je reč o suprotno naelektrisanim česticama. Treći oblik prirodne radioaktivnosti (γ-zračenje) otkrio je P. Vilar (P. Villard), utvrdivši da ono ne skreće u magnetnom polju, a da se odlikuje izuzetnom prodornošću.

Posle ovog malog istorijskog uvoda, vraćamo se opisu fizičkih odlika raspada.

Proces radioaktivnog raspada uvek je egzoterman. Energijski bilans nuklearnog raspada određen je relacijom relativističke mehanike koja prikazuje vezu između mase i energije $E = mc^2$, gde je E ekvivalent energije mase m, a c brzina svetlosti u vakuumu. U skladu sa tim, energija E koja se oslobađa pri radioaktivnom raspada jednaka je:

$$E = M_r c^2 - (M_p c^2 + \sum M_e c^2) \qquad (11.1.1)$$

gde su M_r, M_p i M_e odgovarajuće mase mirovanja jezgra roditelja, potomka i čestica koja se emituju. Energija E oslobađa se u obliku kinetičke energije proizvoda raspada. Prema jednačini (11.1.1) jezgro može da bude radioaktivno samo ako je $E > 0$, odnosno kada je masa mirovanja jezgra roditelja veća od zbira masa mirovanja jezgra potomka i ostalih proizvoda raspada. Ovaj uslov je neophodan, ali ne i dovoljan da se raspad dogodi. Kao što pri raspadu mora da bude ispunjen zakon o održanju energije, jednačina (11.1.1), tako pri raspadu mora da se održi i impuls $\vec{p}$,

ukupni moment impulsa $\vec{I}$, električno naelektrisanje q i barionski broj B[20], leptonski brojevi L', L'', itd. (o ovome će kasnije biti više reči). Kada su svi uslovi zakona o održanju ispunjeni, tada radioaktivni raspad može da se desi, ali sa **određenom verovatnoćom**. U suštini, radioaktivnost je statistička pojava. Istovetna radioaktivna jezgra raspadaju se u različitim trenucima vremena, a unapred ne može da se kaže kada će određeno jezgro da se raspadne. Prirodna statistička veličina koja opisuje radioaktivni raspad jeste verovatnoća raspada nekog jezgra u jedinici vremena. Naziva se *konstanta radioaktivnog raspada* i označićemo je sa ζ. Posmatraćemo sada N jednakih nestabilnih (radioaktivnih) jezgara. Promena broja jezgara u vremenu (ili brzina raspada) srazmerna je broju prisutnih (neraspadnutih) jezgara N u svakom trenutku vremena t. Konstanta proporcionalnosti je veličina ζ:

$$-\frac{dN}{dt} = \zeta N. \tag{11.1.2}$$

Znak „-" označava da se broj radioaktivnih jezgara smanjuje tokom vremena. Inegraljenjem jednačine (11.1.2) dobija se:

$$\int_{N_0}^{N} -\frac{dN}{N} = \int_{0}^{t} \zeta dt \Rightarrow N = N_0 e^{-\zeta t}. \tag{11.1.3}$$

Jednačina (11.1.3) predstavlja zakon radioaktivnog raspada, pri čemu je N – broj radioaktivnih jezgara u trenutku t, N_0 broj radioaktivnih jezgara u trenutku $t = 0$ (početak posmatranja), a t je vreme. Broj radioaktivnih jezgara, prema jednačini (11.1.3) menja se sa vremenom kao eksponencijalno opadajuća funkcija. Jednačina (11.1.3) identična je jednačini (8.3.18) koja prikazuje broj pobuđenih atoma u zavisnosti od vremena. I ovaj broj smanjuje se sa vremenom, jer zračenjem kvanta energije atom prestaje da postoji u pobuđenom stanju. Oba procesa su statističke prirode i odlikuju se određenim vremenom života. Veličina A:

$$A = \zeta N = -\frac{dN}{dt}$$

naziva se *aktivnost*. Aktivnost izražava osobinu preparata u celini (velikog broja radioaktivnih jezgara), a ne određenog jezgra. Pomoću konstante radioaktivnog raspada ζ mogu da se izraze i druge veličine koje predstavljaju fizičku odliku raspada. To su vreme poluraspada $T_{1/2}$ i srednji život jezgra τ. Vreme poluraspada ($T_{1/2}$) predstavlja vreme za koje se broj radioaktivnih jezgara smanji za polovinu. Prema tome: $N = N_0/2$, pa se zamenjivanjem u (11.1.3) dobija:

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\zeta T_{1/2}} \Rightarrow T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\zeta}. \tag{11.1.4}$$

[20] Svakoj čestici može da se pripiše neki barionski broj. Barionski brojevi su celi brojevi. Barionski broj elektrona i γ-kvanta je nula, dok je barionski broj protona i neutrona jedinica. Tako je maseni broj A i barionski broj jezgra. Barionski broj jezgra roditelja mora da bude jednak zbiru barionskog broja jezgra potomaka i barionskih brojeva čestica koje napuštaju jezgro.

Izraz za srednje vreme života τ za proces istog tipa, izveden je u poglavlju 8.3 [videti jednačinu (8.3.19b)]. Ovde prikazujemo samo rezultat:

$$\tau = \frac{1}{\zeta}. \tag{11.1.5}$$

11.2 ALFA-RASPAD

Pri α-raspadu jezgro roditelj emituje jezgro helijumovog atoma, tzv α-česticu. Novo jezgro ili jezgro potomak ima za dve jedinice manji redni broj Z, a za četiri jedinice manji maseni broj A od jezgra roditelja. U procesu α-raspada praktično nastaje pretvaranje jednog hemijskog elementa u drugi. Ako se sa X označi jezgro roditelja, a sa Y jezgro potomak, tada α-raspad može da se prikaže:

$$_zX^A \rightarrow {}_{Z-2}Y^{A-4} + {}_2He^4$$

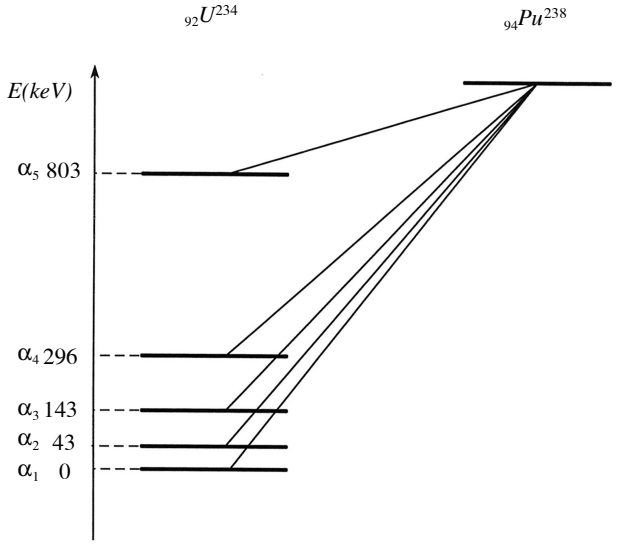
pri čemu je Z redni, a A maseni broj. Neophodan uslov da se dogodi α-raspad jeste da je masa mirovanja jezgra roditelja veća od zbira masa mirovanja jezgra potomka i jezgra α-čestice. Ukupna oslobođena energija pri raspadu je tada[21]:

$$E = [M_r - (M_p + M_\alpha)]c^2 \tag{11.2.1}$$

gde je M_r – masa mirovanja jezgra roditelja, M_p – masa mirovanja jezgra potomka, M_α – masa mirovanja α-čestice, c – brzina svetlosti. Energija E emituje se u obliku kinetičke energije α-čestice i jezgra potomka (pomeraj jezgra potomka zove se uzmak, a energija uzmaka znatno je manja od kinetičke energije α-čestice). α-raspad se obično javlja kod težih jezgara za koje je $Z > 83$. Takođe, javlja se mala grupa α-aktivnih jezgara kod elemenata koji pripadaju retkim zemljama, s masenim brojevima $A = 140–160$. Ova poslednja jezgra odlikuju se znatnim viškom neutrona, a α-raspad je jedna od mogućnosti da se dobije stabilno jezgro. α-čestice koje napuštaju jezgro određenog rednog i masenog broja, imaju po pravilu, jednu istu, strogo određenu energiju. Tačnija merenja, međutim, pokazuju to da u nekim slučajevima spektar energije α-čestica, koje potiču iz istog izotopa, pokazuje finu strukturu, tj. sastoji se od nekoliko diskretnih vrednosti energije koje su bliske jedna drugoj. Ovo se javlja zbog toga što, emitovanjem α-čestice iz jezgra, može nastati jezgro potomak u osnovnom stanju ali i u nekom od pobuđenih stanja energije. Energija α-raspada tada je zbir kinetičke energije α-čestice, energije uzmaka jezgra potomka i energije pobuđenog stanja jezgra potomka, Slika 11.2.1.

Kod teških jezgara opseg energija α-čestica kreće se između 4 i 9 MeV-a, a kod lakših jezgara atoma retkih zemalja, između 2 i 4,5 MeV-a. Vreme poluraspada α-aktivnih jezgara menja se u širokom opsegu. Tako izotop olova $_{82}Pb^{204}$ ima vreme poluraspada od $T_{1/2} = 1{,}4 \times 10^{17}$ godina, a izotop radioaktivnog gasa radona ima vreme poluraspada od 10^{-4} sekundi. Za neke karakteristične izotope vremena poluraspada $T_{1/2}$ i energije E_α emitovanih α-čestica prikazani su u Tabeli 11.1.

[21] Jednačina (11.2.1) istovremeno znači da je energija veze jezgra roditelja niža od zbira energije veze jezgra potomka i α-čestice. Kako je energija veze α-čestice 28 MeV, dakle 7 MeV po nukleonu, raspadaju se obično jezgra koja po nukleonu imaju energiju veze nižu od 7 MeV.



Slika 11.2.1 Spektar energije α-čestica koje emituju radioaktivna jezgra $_{94}Pu^{238}$. U zavisnosti od energije emitovane α-čestice, jezgro potomka nalazi se u osnovnom ili u nekom od pobuđenih stanja.

Tabela 11.1 Vremena poluraspada i energije emitovanih α-čestica karakterističnih izotopa

Izotop	**E_a/MeV**	**$T_{1/2}$**
$_{84}Po^{212}$	8,78	0,3μs
$_{88}Ra^{224}$	5,7	3,64 dana
$_{90}Th^{228}$	5,42	1,91 godina
$_{90}Th^{230}$	4,68	$7{,}5\cdot10^4$ godina
$_{92}U^{238}$	4,2	$4{,}5\cdot10^9$ godina
$_{92}U^{235}$	4,6	$7{,}1\cdot10^8$ godina
$_{94}Pu^{238}$	5,5	88 godina.

Prolazeći kroz određenu sredinu α-čestica stupa u interakciju s atomima i molekulima te sredine, obično jonizujući ih. Tako, malo-pomalo α-čestica gubi od svoje energije. Kada se, konačno, dovoljno uspori, ona zahvata prvo jedan elektron i tako nastaje $(_2He^4)^+$ jon. Zatim zahvata i drugi elektron, pa na kraju od α-čestice nastaje neutralni atom helijuma koji više ne može da vrši jonizaciju. Zbog toga se i domet α-čestice definiše kao rastojanje koje ona može da pređe kroz vazduh, obično pod standardnim uslovima, na temperaturi $t = 20$ °C i pritisku $p = 1$ atm., od svog izvora do tačke kada više ne može da vrši primetnu jonizaciju. Na osnovu dometa α-čestice može da se odredi njena energija. Tako je, prema Gajgerovom empirijskom pravilu, domet R povezan sa energijom α-čestice E, jednačinom:

$$R = a\upsilon^3 = a'E^{3/2} \tag{11.2.2}$$

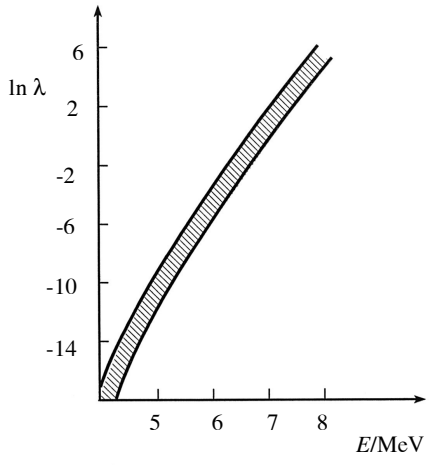
pri čemu su a i a' konstante, dok je υ brzina α-čestice. Gajger i Natal su, dalje, našli i empirijski odnos između dometa α-čestice i vremena poluraspada:

$$\ln R = b + \ln \frac{1}{T_{1/2}} \tag{11.2.3}$$

ili imajući na umu vezu (11.2.2), Gajger-Natalovo pravilo može da se napiše u obliku:

$$\ln E = b' + d' \ln \zeta \tag{11.2.4}$$

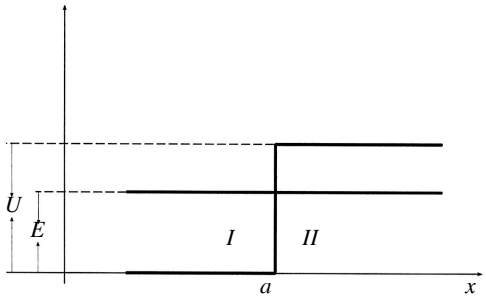
gde su b, b', d i d' empirijske konstante. Jednačine (11.2.3) i (11.2.4) pokazuju da jezgra koja imaju veće vreme poluraspada emituju α-čestice manje energije. Grafički prikaz Gajger-Natalovog pravila dat je na Slici 11.2.2.



Slika 11.2.2 Grafički prikaz Gajger-Natalovog pravila. U šrafiranom području leže sva do sada poznata α-radioaktivna jezgra.

11.2.1 Emisija alfa-čestice iz jezgra – tunel efekt

Gajger-Natalovo pravilo, dobijeno čisto empirijskim putem, sledi i iz teorije α-raspada. Teoriju α-raspada postavili su, nezavisno jedan od drugog, G. Gamov i R.W. Garni i E. U. Kondon (G. Gamov, R. W. Gurney i E.U. Condon), 1928. godine. Prema njihovom tumačenju, emisija α-čestice iz jezgra, može da se objasni samo kvantnomehanički i predstavlja primer tunel efekta. Kao što smo objasnili, tunel efekt je pojava prolaska čestice s ukupnom energijom E kroz potencijalnu barijeru energije U, kada je $E < U$. Prema zakonima klasične mehanike, tunel efekt nije moguć. Evo zašto. Neka se čestica koja ima energiju E, kreće u pozitivnom smeru x-ose, Slika 11.2.3. Područje $x < a$ označeno je sa I, a područje u kojem je $x > a$ označeno je sa II. U tački $x = a$ na česticu počinje da deluje stalni potencijal U. Kako važi zakon o održanju energije, ukupna energija čestice u sredini I mora da bude jednaka ukupnoj energiji čestice u sredini II:



Slika 11.2.3 Šematski prikaz tunel efekta.

$$E_I = E_{II}.$$

U sredini *I* čestica ima samo kinetičku energiju (potencijalna energija jednaka je nuli), pa je $E_I = T_I$, gde je *T* oznaka za kinetičku energiju. U sredini *II* javlja se pozitivni potencijal, pa je ukupna energija čestice jednaka zbiru njene kinetičke i potencijalne energije:

$$E_{II} = T_{II} + U$$

pri čemu je *U* potencijalna energija čestice. Jednačine $E_I = E_{II}$, odnosno $T_I = T_{II} + U$, kojima se izražava zakon o održanju energije, zadovoljene su samo za negativne vrednosti kinetičke energije T_{II}, što sa stanovišta klasične mehanike čini tunel efekt nemogućim. Sa stanovišta kvantne mehanike, tunel efekt može da se dogodi ali s određenom verovatnoćom. Prema 8.5.3, čestici u sredini *I* pridružuje se talasna funkcija ψ_I, a onoj u sredini *II* talasna funkcija ψ_{II}. Verovatnoća nalaženja čestice u sredini *II* iznosi $\psi_{II} \cdot \psi_{II}^* dV$ i može da se odredi rešavanjem odgovarajuće Šredingerove jednačine.

α-raspad, tj. emisija α-čestice iz jezgra predstavlja slučaj tunel efekta, a postupkom koji je sličan onome koji je primenjen u delu 8.5.4, uz korišćenje rezultata i iz 8.5.5, možemo odrediti verovatnoću α-raspada. U gornjem delu Slike 11.2.5 prikazana je potencijalna energija α-čestice u zavisnosti od rastojanja od jezgra *r*. Ova kriva može da se dobije kao zbir krivih prikazanih na Slici 11.2.4. Na levoj strani slike prikazan je stalni negativni potencijal koji vlada u jezgru i iznosi 40–50 MeV-a. U okolini tačke r_0 (poluprečnik jezgra) potencijalna energija naglo se menja do nule, što ukazuje na iščezavanje nuklearnih sila. Ovaj oblik potencijala naziva se potencijalna jama. U prvoj aproksimaciji ova jama može da se posmatra kao jama s beskonačno visokim zidovima. Energija i talasne funkcije određuju se tada rešavanjem Šredingerove jednačine, napisane u sfernim koordinatama, prema izrazu (9.1.28). Pri tom, zavisnost od uglova θ i φ nije bitna, pa se njihovi izvodi uzimaju kao nula:

$$\frac{d^2(r\psi)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)r\psi = 0 \quad r < r_0. \tag{11.2.5}$$

Rešavanjem jednačine (11.2.5) dobija se funkcija $r\psi$, koja ima oscilatorni karakter, sa De Broljijevom talasnom tužinom λ koja je određena impulsom čestice [videti i

(8.6.15)]. Energija čestice može da se izračuna korišćenjem jednačine tipa (8.6.13), sa tom razlikom što je umesto potencijala nula iz 8.6.13. sada stalni negativni potencijal. U skladu s tim, energijski nivoi potencijalne jame (a to su nivoi jezgra) prikazuju se jednačinom:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mr_0^2} + U \tag{11.2.6}$$

gde je h Plankova konstanta, m masa čestice, r_0 poluprečnik jezgra a n je broj koji može da ima vrednosti 1, 2, 3, itd. U je (negativan) potencijal. Prvi član jednačine (11.2.6) označava kinetičku energiju čestice, a sa E_n označeni su nivoi ukupne energije. Ove nivoe popunjavaju protoni i neutroni. Najviši nivoi koji sadrže protone i neutrone leže nekoliko MeV-a ispod nultog nivoa energije. U nekom trenutku dva protona i dva neutrona iz ovih nivoa energije grade α-česticu, koja je stabilnija (energija veze sva četiri nukleona u α-čestici je oko 28,3 MeV-a, dok je energija veze 2 protona i 2 neutrona kada nisu sjedinjeni u α-česticu između 22–24 MeV-a) od pojedinačnih nukleona. Višak oslobođene energije pri stvaranju α-čestice zadržava sama α-čestica u obliku kinetičke energije. To povećava njenu energiju do vrednosti između 2 i 8 MeV-a (zavisno od vrste jezgra) u odnosu na nulti nivo i to je onda (ukupna) energija α-čestice E_α koja je označena horizontalnom linijom na Slici 11.2.5a i c. Na Slici 11.2.4 (desno) prikazana je Kulonova potencijalna energija odbijanja između α-čestice koja nosi dve elementarne količine pozitivnog naelektrisanja i jezgra (potomka) naelektrisanog Z-2 puta (Z je redni broj elementa) na rastojanjima $r \geq r_0$. Ova funkcija ima oblik:

$$U = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2(Z-2)e^2}{r}$$

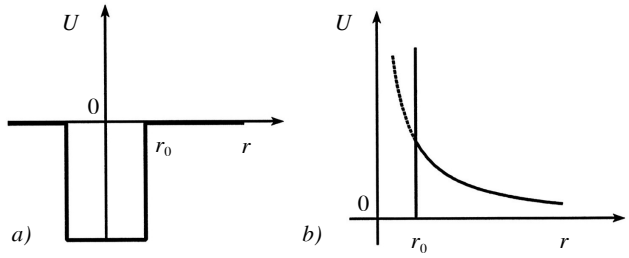
gde je Z redni broj jezgra, e elementarno naelektrisanje, a r rastojanje α-čestice od jezgra. Zbir krivih sa Slike 11.2.4 određuje potencijalnu energiju α-čestice u jezgru $r < r_0$ i izvan njega, $r > r_0$. Na nekom rastojanju r od jezgra, koje je veće od rastojanja r_1 označenog na Slici 11.2.5, α-čestica je, praktično, slobodna. Za $r > r_2$, potencijalna energija α-čestice je nula i tada je ona stvarno slobodna, a njena kinetička energija, prema zakonu o održanju energije koji mora da bude zadovoljen, iznosi E_α, kako je i označeno horizontalnom linijom na Slici 11.2.5c. Kinetička energija oslobođenih α-čestica može da se odredi eksperimentalno. Tako, izotop urana ${}_{92}U^{238}$ (čija će verovatnoća raspada biti proračunata) emituje α-čestice energije 4,2 MeV-a. Talasnu funkciju slobodne α-čestice određujemo rešavanjem Šredingerove jednačine oblika:

$$\frac{d^2(r\psi)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E(r\psi) = 0 \quad r > r_2. \tag{11.2.7}$$

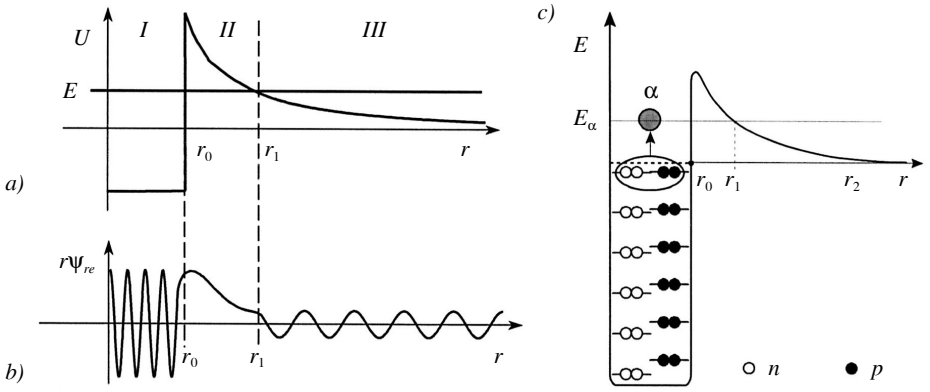
Talasna funkcija ima oscilatorni oblik sa (De Broljijevom) talasnom dužnom koja je znatno veća od one koja se pridružuje α-čestici dok se ona nalazi unutar jezgra (kinetička energija, odnosno impuls p, α čestice mnogo su veći dok je ona u

jezgru nego kada je slobodna; impuls čestice i njena De Broljijeva talasna dužina obrnuto su srazmerni, $\lambda = h/p$, h je Plankova konstanta), Slika 11.2.5b.

Sa Slike 11.2.5 vidi se dalje da je na rastojanju $r_0 \le r \le r_1$, potencijalna energija α-čestice veća od njene ukupne energije, pa se prodiranje α-čestice kroz taj potencijalni bedem naziva tunel efektom. Uzimajući kao primer radioaktivno jezgro urana ${}_{98}U^{238}$ čiji je poluprečnik r=7,5·10^{-15} m [izračunava se po jednačini 1,20 · 10$^{-15}A^{1/3}$ (m), gde je A(=238) maseni broj)] izračunaćemo vrednost odbojnog Kulonovo potencijala za α–česticu koja se nalazi na rastojanju od 10^{-14} m od ostatka jezgra ili od jezgra potomka [u ovom primeru to je torijum (${}_{90}Th^{234}$), po jednačini (11.2.5)]. Zamenjivanjem podataka dobija se vrednost od U = 25,95 MeV-a i ona zaista leži visoko iznad (ukupne) energije α-čestice od 4,2 MeV-a (na Slici 11.2.5 c označenoj sa E_α). Tek na rastojanju od $r_1 = 6,2 \cdot 10^{-14}$ m od jezgra, potencijalna energija α-čestice opada do vrednosti od 4,2 MeV-a. Dakle, put duž kojeg α-čestica „tuneluje" iznosi 6,2·10^{-14}m.



Slika 11.2.4 Potencijalna energija α-čestice: a) u jezgru; b) van jezgra (u oblasti dejstva Kulonove slike).



Slika 11.2.5 Uz α raspad: a) potencijalna energija α-čestice; b) talasne funkcije α-čestice u jezgru (*I*), u oblasti tunel efekta (*II*) i talasna funkcija slobodne α-čestice (*III*); c) energijski nivoi nukleona u jezgru i nastajanje α-čestice.

Sada ćemo, rešavanjem Šredingerove jednačine, odrediti verovatnoću da α-čestica prođe potencijalnu barijeru, tj. da pređe rastojanje $r_0 < r < r_1$. U svakoj tački r između r_0 i r_1 potencijalna energija α-čestice (kaže se potencijalna energija barijere) veća je od energije E α-čestice, a Šredingerova jednačina tada ima oblik:

$$\frac{d^2(r\psi)}{dr^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left[E - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2(Z-2)e^2}{r}\right]r\psi = 0 \qquad (11.2.8)$$

ili:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left[E - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2(Z-2)e^2}{r}\right]u = 0 \qquad (11.2.8a)$$

gde je $r\psi = u$.

Verovatnoća prolaska α-čestice kroz barijeru odnosno koeficijent propustljivosti tada su jednaki i mogu da se prikažu izrazom:

$$T = \left|\frac{u(r_1)}{u(r_0)}\right|^2 = \left|\frac{\psi(r_1)}{\psi(r_0)}\right|^2 \qquad (11.2.9)$$

pri čemu su $\psi(r_1)$, $u(r_1)$ odnosno $\psi(r_0)$ i $u(r_0)$ vrednosti talasnih funkcija u tačkama r_1 i r_0. Pretpostavlja se da rešenje jednačine (11.2.8a) ima oblik:

$$u = \exp\left[-\frac{2\pi y(r)}{h}\right]. \qquad (11.2.10)$$

Znak „-“ u izrazu (11.2.10) označava da talasna funkcija eksponencijalno opada u oblasti u kojoj se događa tunel efekt. Prvi i drugi izvod talasne funkcije *u*, jednačina (11.2.10), po koordinati *r* su:

$$\frac{du}{dr} = -\frac{2\pi}{h}\exp\left[\frac{-2\pi y(r)}{h}\right]y'(r)$$

i:

$$\frac{d^2u}{dr^2} = -\frac{2\pi}{h}\exp\left[\frac{-2\pi y(r)}{h}\right]y''(r) + \frac{4\pi^2}{h^2}\exp\left[\frac{-2\pi y(r)}{h}\right]y'^2(r). \qquad (11.2.11)$$

U jednačini (11.2.11), $y' = dy/dr$ a $y'' = d^2y/dr^2$. Zamenjivanjem izraza (11.2.11) u (11.2.8), dobija se:

$$-\frac{h}{2\pi}y'' + y'^2 - F(r) = 0 \qquad (11.2.12)$$

pri čemu je:

$$F(r) = 2m\left[\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2(Z-2)e^2}{r} - E\right].$$

Član $y'' \cdot h/2\pi$ može da se zanemari jer je mnogo manji od vrednosti $F(r)$, pa sada jednačina (11.2.12) glasi:

$$y'^2 = F(r) \quad \Rightarrow \quad y' = \sqrt{F(r)}\,. \tag{11.2.13}$$

Tražimo rešenje diferencijalne jednačine (11.2.13):

$$\frac{dy}{dr} = \sqrt{F(r)} \quad \Rightarrow \quad y(r_1) - y(r_0) = \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{F(r)}\, dr. \tag{11.2.14}$$

Ako se jednačina (11.2.14) zameni u (11.2.10), dobija se:

$$\frac{\psi(r_1)}{\psi(r_0)} = \frac{u(r_1)}{u(r_0)} = \exp\left\{-\frac{2\pi}{h}[y(r_1) - y(r_0)]\right\} = \exp\left\{-\frac{2\pi}{h}\int_{r_0}^{r_1} F(r)dr\right\} =$$

$$= \exp\left\{-\frac{2\pi}{h}\int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m\left[\frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - E\right]}dr\right\}. \tag{11.2.15}$$

Verovatnoća prolaska α - čestice kroz barijeru je, saglasno jednačini (11.2.9):

$$T = \left(\frac{\psi_1}{\psi_0}\right)^2 = \left(\frac{u_1}{u_0}\right)^2 = \exp\left\{-\frac{4\pi}{h}\sqrt{2mE}\cdot\int_{r_0}^{r_1}\sqrt{\frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\varepsilon_0 E r} - 1}\right\} \tag{11.2.16}$$

gde je $\psi_1 = \psi(r_1)$, odnosno $\psi_0 = \psi(r_0)$ itd. Kako je za $r=r_1$:

$$E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2(Z-2)e^2}{r_1} \quad \Rightarrow \quad r_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2(Z-2)e^2}{E}\,. \tag{11.2.17}$$

Zamenjivanjem jednačine (11.2.17) u (11.2.16), jednačina (11.2.16) dobija oblik:

$$T = \left(\frac{\psi_1}{\psi_0}\right)^2 = \left(\frac{u_1}{u_0}\right)^2 = \exp\left\{-\frac{4\pi}{h}\sqrt{2mE}\int_{r_0}^{r_1}\sqrt{\frac{r_1}{r} - 1}\,dr\right\}. \tag{11.2.18}$$

Integral u eksponentu izraza (11.2.18) rešava se uvođenjem smene:

$$\sqrt{\frac{r_1}{r}} - 1 = t$$

a potom parcijalnim integraljenjem. Kao rezultat dobija se:

$$\int_{r_0}^{r_1} \sqrt{\frac{r_1}{r} - 1}\, dr = r_1 \sqrt{\frac{r}{r_1} - \frac{r^2}{r_1^2}} \Big|_{r_0}^{r_1} - r_1 \arcsin \sqrt{1 - \frac{r}{r_1}} =$$

(11.2.19)

$$= -r_1 \sqrt{\frac{r_0}{r_1} - \frac{r_0^2}{r_1^2}} + r_1 \arcsin \sqrt{1 - \frac{r_0}{r_1}}.$$

Ako se zna da je:

$$\arcsin \sqrt{1 - \frac{r_0}{r_1}} = \frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \tag{11.2.20}$$

onda se smenjivanjem (11.2.20) u (11.2.19) dobija:

$$\int_{r_0}^{r_1} \sqrt{\frac{r_1}{r} - 1}\; dr = -r_1 \sqrt{\frac{r_0}{r_1} - \frac{r_0^2}{r_1^2}} + r_1 \frac{\pi}{2} - r_1 \arcsin \sqrt{\frac{r_0}{r_1}}\; . \tag{11.2.21}$$

Kada se integral (11.2.21) zameni u (11.2.18), dobija se:

$$T = \left(\frac{\psi_1}{\psi_0}\right)^2 = \left(\frac{u_1}{u_0}\right)^2 =$$

$$= \exp\left\{-\frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE}\; r_1 \left[\pi - 2\sqrt{\frac{r_0}{r_1} - \frac{r_0^2}{r_1^2}} - 2 \arcsin \sqrt{\frac{r_0}{r_1}}\right]\right\} \tag{11.2.22}$$

α - čestica se smatra slobodnom kada se nađe u tački sa koordinatom $r=r_1$. Tada energija α - čestice postaje jednaka energiji potencijalne barijere, [videti jednačinu (11.2.17)]:

$$E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{2(Z-2)e^2}{r_1}.$$

Koeficijent transparencije T, koji smo teorijskim putem odredili povezan je s konstantom radioaktivnog raspada ζ (koja predstavlja verovatnoću da se jezgro raspadne u jednoj sekundi) jednačinom [videti poglavlje 8.5.5 i jednačinu (8.5.79)]:

$$\zeta = \frac{\upsilon_1}{2r_0} T \tag{11.2.23}$$

gde je υ_1 brzina kretanja α-čestice u jezgru. Količnik brzine α-čestice i prečnika jezgra, jednačina (11.2.23) može da se razume i kao broj pokušaja koji α-čestica napravi u jednoj sekundi da bi na kraju prošla kroz potencijalni bedem. Kako se α- čestica kreće u potencijalnoj jami prečnika $2r_0$(r_0 je poluprečnik jezgra), to u jednoj sekundi rastojanje $2r_0$ α-čestica, koja ima brzinu υ_1, prelazi n puta. Prema tome:

$$n = \frac{\upsilon_1}{2r_0}.$$

Brzina υ_1 može da se proceni iz De Broljijeve jednačine. Smatraćemo da je De Broljijeva talasna dužina α-čestice uporediva s dimenzijama jezgra i uzećemo da su, npr., dve De Broljijeve talasne dužine α-čestice jednake poluprečniku jezgra:

$$m\upsilon_1 = p_1 = \frac{h}{\lambda}; \quad 2\lambda = r_0 \quad \Rightarrow \quad \upsilon_1 = \frac{2h}{mr_0} \tag{11.2.24}$$

pa je broj pokušaja n koji α- čestica učini u jednoj sekundi da napusti jezgro:

$$n = \frac{h}{mr_0^2} = \frac{6,62608 \times 10^{-34}\ \text{Js}}{(4,0015 \times 1,66054 \times 10^{-27}\ \text{kg}) \times (10^{-14} \times 10^{-14})\ \text{m}^2} = 9,972 \times 10^{20}.$$

Konstanta α-radioaktivnog raspada izračunava se, prema jednačini (11.2.23), množenjem broja pokušaja koje α-čestica napravi u sekundi da napusti jezgro, n i koeficijenta propustljivosti T, dobijenog rešavanjem Šredingerove jednačine, jednačina (11.2.22):

$$nT = \frac{h}{mr_0^2} \exp\left\{-\frac{2\pi}{h} \cdot \sqrt{\frac{2m}{E}} \cdot \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\pi - 2\sqrt{\frac{r_0}{r_1} - \frac{r_0^2}{r_1^2}} - 2 \arcsin \sqrt{\frac{r_0}{r_1}}\right]\right\}.$$

Poslednja jednačina ima složeniji oblik od Gajger-Natalovog pravila ali kvalitativno potvrđuje njegov zaključak da jezgra koja emituju α-čestice s većom energijom imaju manje vreme poluraspada, odnosno veću konstantu radioaktivnog raspada ζ. Zaista, za veću energiju E, r_1 je manje, pa izraz u srednjoj zagradi kod eksponencijalnog faktora postaje manji; i član uz eksponencijalni faktor (ispred srednje zagrade) smanjuje se porastom energije E. Zbog toga je za veće E ceo eksponent veći, a samim tim je veća i konstanta radioaktivnog raspada ζ. Pomoću jednačine (11.2.23) može da se izračuna i vrednost konstante radioaktivnog raspada u određenom slučaju. Uzimamo, opet, izotop urana ${}_{92}U^{238}$ kao primer. Poznato je da ovaj izotop emituje α čestice čija je energija E=4,2 MeV, a za r_0 uzima se vrednost 10^{-14}m, pa se r_1 izračunava iz uslova:

$$r_1 = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\varepsilon_0 E} = 6,171\times10^{-14}\ \text{m}.$$

Zamenjivanjem u (11.2.22) dobija se za koeficijent transparencije $T = 1,334\times10^{38}$, pa je konstanta radioaktivnog raspada ζ:

$$\zeta = nT = 9,972\times10^{20}\times1,334\times10^{-38} = 1,3300\times10^{-17}\ \text{s}^{-1}.$$

Vreme poluraspada je:

$$T_{1/2} = \frac{0,693}{\zeta} = 0,5210\times10^{17}\ \text{s}^{-1} = 1,65\times10^{9}\ \text{godina}.$$

Vreme poluraspada je ${}_{92}\text{U}^{238}$, dobijeno eksperimentalnim putem, iznosi 4,49x10^9 godina. S obzirom na aproksimacije i pretpostavke učinjene pri proračunu, slaganje teorijskog i eksperimentalnog rezultata (isti red veličine) smatramo sasvim dobrim.

11.3 BETA-RASPAD

Pri β^--raspadu, jezgro roditelj s masenim brojem *A* i rednim brojem *Z*, koje je označeno simbolom *M*, spontano emituje elektron *e* i neutralnu česticu, praktično bez mase, koja se zove antineutrino $\tilde{\nu}$. Novonastalo jezgro potomak, koje je označeno sa *N*, ima za jedinicu veći redni broj i nepromenjeni maseni broj u odnosu na prvobitno jezgro (jezgro roditelj), jednačina (11.3.1):

$${}_ZM^A \rightarrow {}_{Z+1}N^A + e + \tilde{\nu}. \qquad (11.3.1)$$

Prema (11.3.1) pri β^--raspadu jedan od neutrona u jezgru pretvara se u proton, pa se i pri ovoj vrsti radioaktivnog raspada (kao i kod α-raspada o kojem je ranije bilo reči) jedan hemijski element pretvara u drugi. Drugi tip β-raspada naziva se β^+-raspad i predstavlja proces pri kojem jezgro spontano emituje pozitron i neutralnu česticu, praktično bez mase, koja se naziva neutrino, ν. Pri ovom raspadu nastaje jezgro koje ima za jedinicu manji redni broj i nepromenjeni maseni broj u odnosu na prvobitno jezgro, jednačina (11.3.2):

$${}_ZM^A \rightarrow {}_{Z-1}N^A + e^+ + v: \qquad (11.3.2)$$

Prema tome, postoje dva tipa β-raspada, elektronski ili β^--raspad i pozitronski β^+-raspad. Pri β^+- raspadu jedan proton u jezgru pretvara se u neutron uz emisiju pozitrona i neutrina. U grupu β-raspada spada i elektronski zahvat ili kako se često zove *K*-zahvat. Pri *K*-zahvatu jezgro zahvata elektron iz *K*-sloja atomskog omotača, a iz jezgra se emituje neutrino:

$$e + {}_ZM^A \rightarrow {}_{Z-1}N^A + v. \qquad (11.3.3)$$

Pri uzajamnom dejstvu neutrina, odnosno antineutrina i jezgara, može da dođe do emisije elektrona odnosno pozitrona:

$$\nu + {}_ZM^A \rightarrow {}_{Z+1}N^A + e; \qquad \tilde{\nu} + {}_ZM^A \rightarrow {}_{Z-1}N^A + e^+. \tag{11.3.4}$$

β-raspad je uslovljen slabim silama i predstavlja primer slabog uzjamnog dejstva. Kako je intenzitet slabe sile za oko 24 reda veličine manji od intenziteta jake (nuklearne) sile, to su prosečna vremena poluraspada β-radioaktivnih jezgara reda veličine minuta ili časa. Pri β-raspadu raspada se pojedinačni nukleon, pa može da se smatra da se proces β-raspada dešava unutar nukleona, a da samo prisustvo jezgra kao sredine u kojoj se događa raspad nije bitno. Tako se i slobodni neutron *n* raspada na proton *p*, elektron *e* i antineutrino $\tilde{\nu}$, s vremenom poluraspada od 11,7 minuta. Jednačina (11.3.5) prikazuje mehanizam β^--emisije:

$$ {}_0n^1 \rightarrow {}_1p^1 + e + \tilde{\nu}\,. \tag{11.3.5}$$

Prema tome, neki od neutrona u jezgru raspada se na proton, elektron i antineutrino. Elektron i antineutrino napuštaju jezgro. Mehanizam β^+ emisije sličan je β^- emisiji, s tom razlikom što se proton raspada na neutron, pozitron i neutrino. Pozitron i neutrino napuštaju jezgro, jednačina (11.3.6):

$$ {}_1p^1 \rightarrow {}_0n^1 + e^+ + \nu\,. \tag{11.3.6}$$

Smatra se da elektron i antineutrino (kod β^+-raspada), a pozitron i neutrino (kod β^+- raspada), nastaju u trenutku raspada.

β^--radioaktivna jezgra vrlo su rasprostranjena u prirodi (β^+), se veštački dobijaju u laboratorijama) i mogu da imaju bilo koju vrednost masenog broja *A*, za razliku od α - emitera. α - emiteri su ili vrlo teška jezgra ili jezgra nekih elemenata iz grupe retkih zemalja.

Oslobođena energija pri jediničnom aktu nekog β-raspada kreće se između 0,02 MeV-a, u slučaju raspada tricijuma:

$$ {}_1H^3 \rightarrow {}_2He^3 + e + \tilde{\nu} + 0,02\ \text{MeV} \tag{11.3.7}$$

do 13,4 MeV-a, kod raspada izotopa bora ($_5\mathrm{B}^{12}$) :

$$ {}_5B^{12} \rightarrow {}_6C^{12} + e + \tilde{\nu} + 13,4\ \text{MeV}\,. \tag{11.3.8}$$

U energijskom pogledu, β -raspad može da se dogodi kada je:

$$m_{jM} > m_{jN} + m_e \tag{11.3.9}$$

m_{jM}, m_{jN}, i m_e su mase mirovanja jezgra roditelja, jezgra potomka i eklektrona, redom.

Jednačinu (11.3.9) izrazićemo i preko masa atoma odgovarajućih elemenata *M* i *N*. Kako neutralni atom potomka ima u omotaču jedan elektron više od neutralnog atoma roditelja (pri β^- - emisiji redni broj potomka povećava se za jedinicu u odnosu na jezgro roditelja), jednačina (11.3.9) može da se napiše u obliku:

$$m_{jM} + m_{Ze} > m_{jN} + m_{Ze} + m_e \Rightarrow m_{aM} > m_{aN}$$

gde su m_{aM} i m_{aN} mase neutralnih atoma roditelja i potomka. Energija β-raspada (E_{β^-}) na osnovu prethodne jednačine iznosi:

$$E_{\beta^-} = (m_{aM} - m_{aN}) . \tag{11.3.10}$$

Dalje, β^+-raspad može da se dogodi ako je:

$$m_{jM} > m_{jN} + m_{e^+} \tag{11.3.11}$$

gde je m_{e^+} masa pozitrona. Posmatrajući sada jednačinu (11.3.11) u odnosu na neutralne atome roditelja i potomka, napisaćemo:

$$m_{jM} + m_{Ze} + m_e > m_{jN} + m_{Ze} + 2m_e \Rightarrow m_{aM} > m_{aN} + 2m_e . \tag{11.3.12}$$

Jednačina (11.3.12) pokazuje da β^+ - raspad može da se dogodi samo ako je masa mirovanja atoma roditelja bar za iznos dve mase mirovanja elektrona veća od mase mirovanja potomka. Energija β^+ - raspada (E_{β^+}), prema tome, je:

$$E_{\beta^+} = [m_{aM} - (m_{aN} + 2m_e)]c^2 . \tag{11.3.13}$$

Na sličan način napisaćemo za *K*-zahvat:

$$m_{jM} + m_e > m_{jN} \qquad \Rightarrow \qquad m_{aM} > m_{aN}$$

jer jezgro roditelj ima za jedinicu veći redni broj od jezgra potomka. Energija *E* koja se oslobađa pri *K*-zahvatu, E_K je:

$$E_K = (m_{aM} - m_{aN})c^2 . \tag{11.3.14}$$

I pozitronski raspad i *K*-zahvat dovode do istog rezultata: jedan proton u jezgru biva zamenjen neutronom. Prema tome, β^+ - raspad i elektronski raspad su konkurentni procesi. Sa energijske tačke gledišta, uporediti jednačine (11.3.13) i (11.3.14), elektronski raspad je povoljniji. Takođe, može da se dogodi da je u skladu sa jednačinama (11.3.13) i (11.3.14), elektronski raspad moguć, a da β^+-raspad nije. To se događa kada je:

$$m_{aN} + 2m_e > m_{aM} > m_{aN} .$$

Sasvim uopšteno možemo zaključiti da β-raspadom nestabilno jezgro roditelj prelazi u stabilnije jezgro potomka koje se odlikuje većom energijom vezivanja po nukleonu što ćemo pokazati analizom energija veze po nukleonu **izobarnih jezgara**.

Proučavanjem izobarnih jezgara [izobari imaju isti maseni broj *A*, a različit broj protona *Z*, odnosno neutrona (*A*-*Z*) u jezgru] može da se ustanovi, da pri određenom masenom broju *A*, kada je *A* neparan broj, postoji samo **jedno** stabilno jezgro [I Matauhovo (J. Mattauch) pravilo]. Kada je maseni broj *A* paran, tada postoje **bar dva** stabilna jezgra, čiji se redni brojevi razlikuju za dve jedinice i imaju i parni broj protona i parni broj neutrona (ovo je II Matauhovo pravilo). Ova pravila

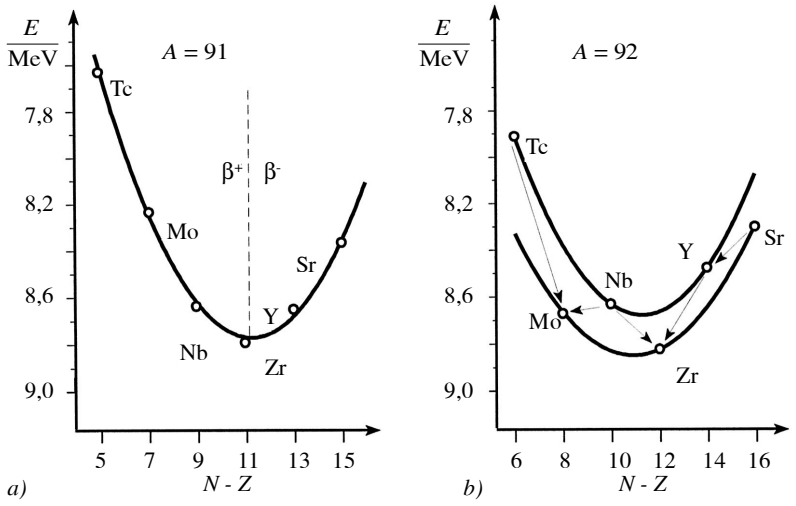
postaju očigledna ako se, kao na Slici 11.3.1a, prikažu energije vezivanja po nukleonu u zavisnosti od razlike broja neutrona i protona, *N-Z*, za izobare s neparnim masenim brojem A. Ova zavisnost izražena je parabolom u čijem maksimumu leži jezgro sa određenom vrednošću za *N-Z*. U našem primeru to je jezgro cirkonijuma ${}_{40}Zr^{91}$, jedino stabilno jezgro s masenim brojem 91. Sva jezgra koja na paraboli leže levo i desno od cirkonijuma su radioaktivna. Jezgra Y i Sr su β^--aktivna, a Tc, Mo i Nb su β^+-radioaktivna:

$$ {}_{43}Tc^{91} \rightarrow \beta^+ + \nu + {}_{42}Mo^{91} \qquad {}_{38}Sr^{91} \rightarrow \beta^- + \tilde{\nu} + {}_{39}Y^{91} $$

$$ {}_{42}Mo^{91} \rightarrow \beta^+ + \nu + {}_{41}Nb^{91} \qquad {}_{39}Y^{91} \rightarrow \beta^- + \tilde{\nu} + {}_{40}Zr^{91} $$

$$ {}_{41}Nb^{91} \rightarrow \beta^+ + \nu + {}_{40}Zr^{91}. $$

Kriva koja prikazuje energije vezivanja po nukleonu u zavisnosti od *N-Z*, predstavljena je Slikom 11.3.1, za izobare s parnim masenim brojem *A*. Tačke leže na dvema parabolama. Na donjoj paraboli, kojoj odgovara veća energija vezivanja po nukleonu za određeno *N-Z*, leže jezgra tipa paran-paran (i broj neutrona i broj protona su im parni brojevi). Na gornjoj paraboli leže jezgra tipa neparan-neparan (i broj protona i broj neutrona su im neparni brojevi). U navedenom primeru stabilni izobari (maseni broj *A*=92) su jezgra ${}_{40}Zr^{92}$ i ${}_{42}Mo^{92}$. Jezgra ${}_{38}Sr^{92}$ i ${}_{39}Y^{92}$ su β^--aktivna, a jezgro ${}_{43}Tc^{92}$ je β^+-radioaktivno. Zanimljivo je to da jezgro ${}_{41}Nb^{92}$ može da pokazuje kako β^--aktivnost tako i β^+ aktivnost. U opštem slučaju, prema II Matauhovom pravilu, može da postoji više stabilnih izobara s parnim brojem protona i neutrona. Njihovi redni brojevi moraju da se razlikuju za dve jedinice. Prema Slici 11.3.1 jasno je da ${}_{42}Mo^{92}$ ima nižu energiju vezivanja od ${}_{40}Zr^{92}$. Prelaz ${}_{42}Mo^{92}$ u ${}_{40}Zr^{92}$ mogao bi da se ostvari emisijom dva pozitrona, što nije verovatno.



Slika 11.3.1 Zavisnost energije vezivanja po nukleonu od N-Z (N je broj neutrona, a Z broj protona): a) za izobare sa neparnim masenim brojem A; b) za izobare sa parnim masenim brojem.

Optimalna vrednost broja Z za određeni maseni broj A može da se odredi kao ekstremna vrednost funkcije energije veze. Tačan oblik funkcije energije veze nije poznat ali su u upotrebi približne funkcije koje proizlaze iz određenog modela jezgra (pogledati poglavlje o modelima jezgra). Jednu od njih predložio je Fon Vajczeker, na osnovu modela kapi:

$$B = a_1 A - A_2^{2/3} a_3 - \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_4 \frac{(A/2 - Z)^2}{A}. \qquad (11.3.15)$$

U jednačini (11.3.15) B je energija veze po nukleonu. Kada se potraži prvi izvod funkcije B po promenljivoj Z, dB/dZ i izjednači se s nulom, dobija se jednačina pomoću koje se određuje vrednost Z_{opt} koja predstavlja apscisu maksimuma energije veze:

$$\frac{dB}{dZ} = -\frac{2a_3 Z_{opt}}{A^{1/3}} + \frac{2a_4(A/2 - Z_{opt})}{A} = 0 \quad \Rightarrow \quad Z_{opt} = \frac{a_4 A}{2(a_4 + a_3 A^{2/3})}.$$

Ako se zamene vrednosti empirijskih konstanti a_3 i a_4, dobija se za Z_{opt}:

$$Z_{opt} = \frac{A}{2 \times 0,015 \times A^{2/3}}.$$

Kada je redni broj jezgra Z (za određenu vrednost masenog broja A) manji od optimalne vrednosti Z_{opt}, $Z < Z_{opt}$, jezgro je nestabilno i pokazuje β^--radioaktivnost, dok su jezgra kod kojih je $Z > Z_{opt}$, β^+-radioaktivna.

Pri β^--raspadu, za razliku od α-raspada, jezgro napuštaju dve čestice. Prema tome, za β^--raspad karakteristična je, ne samo ukupna energija koja se oslobađa, već i raspodela te energije na čestice koje se emituju (jedan vrlo mali deo energije odlazi na uzmak jezgra potomka i obično se pri razmatranju zanemaruje). Oslobođena energija pri β^- - raspadu E_β ispoljava se kao kinetička energija emitovanih čestica i to kao kinetička energija elektrona T_e, antineutrina T_ν (ili pozitrona i neutrina) i kinetička energija jezgra potomka T_{jp}:

$$E_{\beta^-} = T_e + T_{\tilde{\nu}} + T_{jp}; \qquad E_{\beta^-} \approx T_e + T_{\tilde{\nu}}$$

$$E_{\beta^+} = T_{e^+} + T_\nu + T_{jp}; \qquad E_{\beta^+} \approx T_e + T_\nu. \qquad (11.3.16)$$

Zbog ispunjenosti zakona o održanju impulsa, važi jednačina:

$$\vec{p}_e + \vec{p}_{\tilde{\nu}} + \vec{p}_{jp} = 0$$

$$\vec{p}_{e^+} + \vec{p}_\nu + \vec{p}_{jp} = 0. \qquad (11.3.17)$$

Kako je radioaktivnost statistička pojava, raspodela energije raspada između elektrona i antineutrina je (i pozitrona i neutrina) slučajna. To znači, da odnos između energije koju nosi elektron i energije koju ima antineutrino (pozitron i neutrino) može da bude bilo koji. Zato kinetička energija elektrona i antineutrina, statistički posmatrano, može da se kreće od nule pa do neke najveće moguće vrednosti E_m. Ovakav se rezulatat, u obliku potpuno određene raspodele *N(E)* emitovanih elektrona po energijama, i dobija pri posmatranju raspada velikog broja identičnih β^--aktivnih jezgara. Ova raspodela zove se još i spektar energije elektrona kod β^--raspada. Na Slici 11.3.2 prikazan je takav spektar, gde *N(E)* označava broj elektrona s nekom energijom *E*. Ovakav kontinualni spektar, predstavljen glatkom krivom, završava se nekom maksimalnom energijom E_m. Kontinualnost spektra emitovanih elektrona kod β^--raspada navela je 1930. godine Paulija da predskaže postojanje antineutrina i neutrina i postavi hipotezu prema kojoj se pri β-raspadu iz jezgra emituje par čestica. Kod β^--raspada emituju se elektron i antineutrino, a kod β^+-raspada pozitron i neutrino. Prema tome u jednom aktu β-raspada emituje se energija koja odgovara vrednosti E_m sa Slike 11.3.2, a ova energija na proizvoljni način raspodeljuje se između elektrona i antineutrina (kod β^-), odnosno između pozitrona i neutrina (kod β^+-raspada). Maksimalna energija sa Slike 11.3.2 (E_m) praktično je jednaka energiji β^--raspada, [videti jednačine (11.3.10) i (11.3.16)].

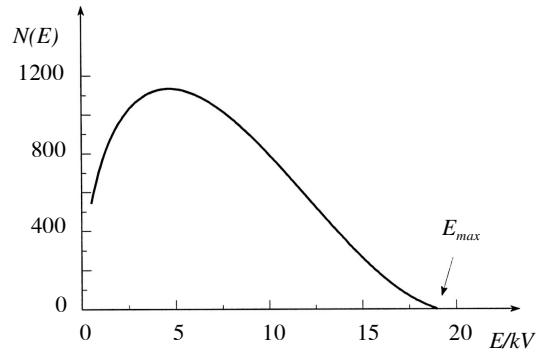
Pored energije i impulsa kod β^--raspada održava se i moment impulsa. Ukupni moment impulsa dobija se slaganjem orbitnog i spinskog momenta. Prema tome, za par čestica, elektron i antineutrino, ukupni moment impulsa je zbir orbitnog moment njihovog relativnog kretanja i njihovog ukupnog spinskog momenta. U slučaju β^--raspada relativni orbitni moment elektrona i antineutrina (pozitrona i neutrina) obično je nula. S druge strane, iz eksperimentalnih podataka poznato je to da razlika spinova jezgara roditelja i potomka može da bude 0 $(\Delta I = 0)$, npr. kod raspada ${}_8O^{14} \rightarrow {}_7N^{14} + e^+ +$ v gde i ${}_8O^{14}$ i ${}_7N^{14}$ imaju spin$1\hbar$ ili ± 1 $(\Delta I = \pm 1)$ kao u slučaju ${}_2He^6 \rightarrow {}_3Li^6 + e^- + \tilde{\nu}$, pri čemu jezgra ${}_2He^6$ i ${}_3Li^6$ imaju spinove 0 i $1\hbar$, redom. Kako važi zakon o održanju spinova (spin jezgra roditelja mora da bude jednak zbiru spinova jezgra potomka i svih čestica koje se emituju), to sledi da ukupni spinski moment S_z [22] za par čestica elektron i antineutrino (pozitron i neutrino) može da bude 0 ili $1\hbar$. Kako elektron (i pozitron) imaju polubrojne spinove, pa može da se zaključi da su i neutrino (i antineutrino) čestice sa polubrojnim spinom $(s_z = 1/2\ \hbar)$.

Navedeni primeri odnose se na tzv. dozvoljene prelaze, a to znači da se raspadi ovog tipa odlikuju relativno velikom verovatnoćom raspada.[23]

Raspad slobodnog neutrona može da se predstavi kao:

[22] S_z je, u stvari, projekcija spina na *z*-osu.

[23] Orbitni momenti emitovanog elektrona i antineutrina ne moraju uvek da budu nula – oni mogu da se nalaze npr. u *p* stanju (l=1), a takvi prelazi zovu se zabranjeni i tada razlika spinova roditelja i potomka mora da bude veća od 1, npr. ± 2. Verovatnoća raspada ovih jezgara je mala, pa se takva jezgra odlikuju velikim vremenom poluraspada.



Slika 11.3.2 Spektar energije emitovanih elektrona pri β-raspadu. Na ordinati je predstavljen broj elektrona s određenom energijom, a na apscisi je energija E. Kriva seče apscisnu osu u tački E_m koja je jednaka energiji β-raspada.

$$\underset{1/2}{n} \rightarrow \underset{1/2}{p} + \underset{1/2}{e} + \tilde{\nu}.$$

Ispod svake čestice napisane su vrednosti kvantnih brojeva spina. Spinski kvantni broj neutrona je 1/2, pa je i projekcija ukupnog momenta impulsa (a to je zbir orbitnog i spinskog dela) neutrona koji miruje $\pm 1/2\hbar$, dakle i on je polubrojni. Projekcija ukupnog momenta u konačnom stanju jednaka je algebarskoj sumi projekcija orbitnih i spinskih momenata svih čestica. Kako su projekcije svih orbitnih momenata u principu celobrojne (u ovom slučaju su nula jer su orbitni momenti nula), projekcija ukupnog momenta može da bude polubrojna samo pri polubrojnoj vrednosti spina antineutrina (i neutrina), jer su i proton i elektron (i neutron i pozitron) čestice s polubrojnim spinovima. Znatno je, međutim, teže bilo odrediti tačne vrednosti spinova neutrina i antineutrina. Godinama se jednostavno smatralo da ovaj spin iznosi $1/2\hbar$, mada ni vrednost od $3/2\hbar$ u principu nije mogla biti isključena. Posle dugogodišnjih istraživanja, na osnovu pravila izbora za različite raspade, kao i nekih drugih podataka, zaključeno je da kvantni broj spina neutrina i antineutrina mora da bude 1/2, odnosno da je $s_z = 1/2\hbar$.

Kao što je pomenuto, pri β-raspadu (kao i kod drugih raspada) moraju da budu ispunjeni zakoni o održanju naelektrisanja, barionskog i lepotonskih brojeva. Barionski i leptonski brojevi su celobrojni i aditivni kao i naelektrisanje. Barioni (u koje spadaju proton i neutron) imaju barionski broj različit od nule, dok su im leptonski brojevi nula. Tako, proton i neutron imaju barionske brojeve 1 (a leptonske nula). Barioni imaju polubrojne spinove i spadaju u fermione. Leptoni su lake čestice (njihovo međusobno dejstvo uslovljeno je slabim silama) sa leptonskim brojevima različitim od nule, a barionskim brojem jednakim nuli. Leptoni imaju, takođe, polubrojni spin i predstavljaju fermione. Elektron, pozitron, elektronski (postoje i mezonski) antineutrino i neutrino su leptoni. Vrednost prvog leptonskog broja elektrona i neutrina je +1, dok kod pozitrona i antineutrina iznosi –1. Ostali leptonski brojevi elektrona, pozitrona, elektronskog neutrina i antineutrina su nula. Kod radioaktivnih raspada održavaju se naelektrisanja, barionski i leptonski brojevi. Ako je pre raspada naelektrisanje bilo 0, ono mora da bude takvo i posle raspada. Ako je barionski broj pre raspada bio 1, mora da bude 1 i posle raspada, itd. Uz čestice koje učestvuju u β^-i β^+-raspadu označili smo vrednosti njihovih naelektrisanja (Z), ba-

rionskih (B) i prvih leptonskih brojeva (L), da bi se videla ispunjenost odgovarajućih zakona održanja:

$$
\begin{array}{lcccc}
 & {}_0n^1 \rightarrow & {}_1p^1 + & e + & \tilde{\nu} \\
Z= & 0 \quad & 1 \quad & -1 \quad & 0 \\
B= & 1 \quad & 1 \quad & 0 \quad & 0 \\
L= & 0 \quad & 0 \quad & 1 \quad & -1
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{lcccc}
 & {}_1p^1 \rightarrow & {}_0n^1 + & e^+ & + \nu \\
Z= & 1 \quad & 0 \quad & 1 \quad & 0 \\
B= & 1 \quad & 1 \quad & 0 \quad & 0 \\
L= & 0 \quad & 0 \quad & -1 \quad & +1.
\end{array}
$$

Parovi elektron-pozitron, neutrino-antineutrino, predstavljaju primere parova **čestica-antičestica**. Skoro svakoj čestici može da se pridruži antičestica (antičesticu nemaju „prave" neutralne čestice: kod njih su, pored naelektrisanja i ostali brojevi: barionski, leptonski jednaki nuli). Antičestica je kao slika u ogledalu čestice. Čestica i antičestica imaju iste mase, a naelektrisanja, barionski (ili leptonski) brojevi su im suprotnog znaka. Sistem čestica – antičestica je „istinski" neutralni sistem. Tako i proton ima antičesticu antiproton, antičestica neutrona je antineutron. Kao što će se kasnije videti, čestica i antičestica mogu da se „poniš̌te", posle čega nastaje elektromagnetno zračenje velike energije, npr. γ-zračenje. Moguć je i suprotni proces – nastajanje parova čestica iz γ-kvanata.

11.3.1 K-zahvat

K-zahvat je konkurentski proces β^+-raspadu. Razlikuje se od β^+-raspada po tome što se iz jezgra emituje samo jedna čestica, neutrino, koja sa sobom odnosi tačno određenu energiju. Na primer:

$$e + {}_{23}\mathrm{V}^{49} \rightarrow {}_{22}\mathrm{Ti}^{49} + \nu\,.$$

Dakle, jezgro (u ovom slučaju vanadijuma) zahvata elektron iz K sloja atomskog omotača, iz jezgra izleće neutrino, a u jezgru jedan proton biva zamenjen neutronom:

$$e + p \rightarrow n + \nu\,.$$

Određivanjem uzmaka jezgra potomka pri K-zahvatu, može da se odredi impuls neutrina $\vec{p}_\nu$. Energija uzmaka izračunava se uz pretpostavku da je jezgro roditelja mirovalo pre K-zahvata. Saglasno zakonu o održanju impulsa, impuls neutrina koji napušta jezgro kod K-zahvata, istog je intenziteta i pravca, a suprotnog je smera u odnosu na impuls jezgra potomka, $\vec{p}$:

$$\vec{p}_\nu + \vec{p} = 0\,. \qquad (11.3.18)$$

Zakon o održanju energije može da se napiše sada kao:

$$c|\vec{p}_\nu| + \frac{p^2}{2M_a} = E \tag{11.3.19}$$

pri čemu je c brzina svetlosti, a $c|\vec{p}_\nu|$ je energija neutrina za koji se pretpostavlja da se prostire brzinom svetlosti, M_a je masa jezgra potomka, a E energija koja se oslobađa pri K-zahvatu. Iz jednačina (11.3.18) i (11.3.19) sledi:

$$E_{uz} = \frac{p^2}{2M_a} = \frac{E^2}{2M_a c^2}\,. \tag{11.3.20}$$

Jednačina (11.3.20) može da se dobije zamenom $|\vec{p}_\nu|$ iz jednačine (11.3.18) u (11.3.19). Tada se dobija:

$$-\frac{p^2}{2M_a} + cp + E = 0 \Rightarrow p_{1/2} = M_a c\left[-1 \pm \sqrt{1 + \frac{2E}{M_a c^2}}\right].$$

Izraz u zagradi razvije se u Maklorenov red, a kao dovoljno dobra aproksimacija uzimaju se prva dva člana jer je $E \ll M_a c^2$:

$$\sqrt{1 + \frac{2E}{M_a c^2}} \sim 1 + \frac{E}{M_a c^2}$$

pa se za p dobija:

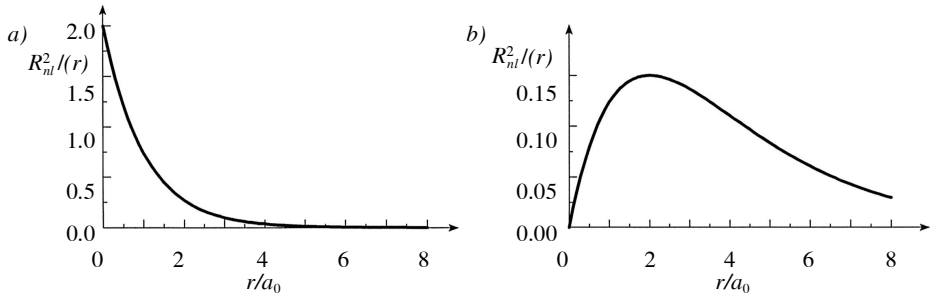
$$p = \frac{E}{c}\,. \tag{11.3.21}$$

Zamenjivanjem (11.3.21) u (11.3.20) dobija se:

$$E_{uz} = \frac{E^2}{2M_a c^2}\,.$$

Energija uzmaka relativno je mala veličina, a eksperimentalno može da se odredi samo za veoma laka jezgra.

Naziv K-zahvat znači da dolazi do zahvatanja tzv. K elektrona, dakle elektrona iz K-sloja atomskog omotača, koji je i najbliži jezgru. Ovo ima i teorijsko opravdanje. Jedino se kod *s*-orbitale, radijalna funkcija gustine verovatnoće razlikuje od nule za $r = 0$ (što odgovara položaju jezgra), Slika 11.3.3. S druge strane, K-zahvat se zapaža kod težih atoma i verovatnoća za K-zahvat povećava se s povećanjem mase jezgra. To se dešava zato što je kod težih atoma elektronsko naelektrisanje skoncentrisano bliže jezgru, a to pokazuje i tok radijalne funkcije gustine verovatnoće nalaženja elektrona, $\Psi \cdot \Psi^*$. Ova funkcija kod težih jezgara ima strmiji tok i za $r = 0$ ima veću vrednost od vrednosti funkcije gustine verovatnoće nekog lakšeg atoma. Kao posledica K-zahvata obično se javlja karakteristično rendgensko



Slika 11.3.3 Radijalne funkcije gustine verovatnoće za *1s* i *2p* orbitalu.

zračenje, koje nastaje pri popunjavanju praznine u K-sloju atomskog omotača, stvorene zahvatanjem elektrona. Istovremeno, otkrivanjem ovog pratećeg *x*-zračenja posredno se dokazuje da se dogodio K-zahvat. Popunjavanje praznine u K-sloju ne mora obavezno da bude praćeno emisijom kvanata *x*-zračenja. Drukčiji put je tzv. neradijacioni prelaz pri kojem se ekvivalent energije (*x*-kvanta) predaje nekom od elektrona iz gornjih slojeva atomskog omotača. Ovaj elektron biva izbačen iz atoma s kinetičkom energijom koja je jednaka razlici primljene energije i energije veze koju je elektron imao u atomu.

11.3.2 Neutrino i antineutrino

Kao što smo pomenuli, zadovoljavajuće teorijsko objašnjenje β-raspada zasnovano je na pretpostavci da se pri β^--raspadu iz jezgra emituju dve čestice, elektron i antineutrino, a pri β^+-raspadu pozitron i neutrino. S obzirom na to da su mase mirovanja neutrina i antineutrina bliske nuli i da je reč o česticama bez naelektrisanja, koje su zbog toga u slabom uzajamnom dejstvu sa sredinom kroz koju prolaze, razumljivo je da je od trenutka postuliranja neutrina i antineutrina pa do njihovog otkrivanja, moralo da prođe dosta vremena. Za dobijanje dokaza da antineutrino prati β^--raspad korišćene su dve metode. Prva se sastojala u proučavanju uzmaka jezgra pri β-emisiji. Kada radioaktivno jezgro emituje jednu ili više čestica, onda novonastalo jezgro potomka odskoči – uzmakne brzinom koja je određena, kao što je već rečeno, zakonom o održanju impulsa. Ako je emitovan samo elektron, onda se i pravac i brzina uzmaka razlikuju od onih kada je emitovan i antineutrino. Dokazivanje postojanja antineutrina na ovaj način bilo je otežano jer je energija uzmaka mala veličina. Dobijeni rezultati, na osnovu ovakvih merenja, nisu protivrečili hipotezi o emisiji antineutrina. Druga metoda za otkrivanje antineutrina zasniva se na posmatranju njegovog sadejstva s protonom, a zatim praćenjem interakcija u kojima učestvuju čestice nastale pri uzajamnom dejstvu antineutrina i protona. Interakciju antineutrina i protona prikazujemo relacijom:

$$p + \tilde{\nu} \rightarrow n + e^+ \tag{11.3.22}$$

u kojoj se proton pri interakciji s antineutrinom pretvara u neutron uz nastajanje pozitrona. Nastali pozitron sudario bi se, zatim, kratko vreme posle svog nastanka, s elektronom, pri čemu dolazi do *anihilacije* (poništavanja) para elektron-pozitron uz nastajanje dva γ kvanta (videti i poglavlje 11.4.3):

$$e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma \ (h\nu_\gamma = 0.51 MeV) . \qquad (11.3.23)$$

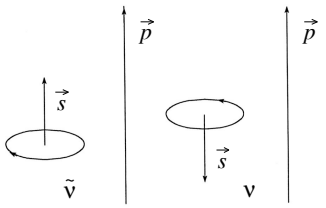
Teorijska izračunavanja, međutim, pokazuju da je verovatnoća interakcije antineutrina s protonom tako mala da bi antineutrino u proseku morao da pređe kroz vodu put od oko stotinu svetlosnih godina (svetlosna godina je put koji svetlost pređe za godinu dana), pre nego što bi došlo do ovakvog uzajamnog dejstva. S druge strane, verovatnoća ovakve interakcije bila bi znatno veća pri vrlo velikom fluksu antineutrina. Izuzetno veliki fluks antineutrina očekuje se u blizini reaktora za nuklearnu fisiju, jer se za vreme rada reaktora stvara velika količina radioaktivnih elemenata koji su β^--aktivni. Polazeći od ovih pretpostavki eksperiment dokazivanja postojanja antineutrina izveli su Rajns i Kauen (F. Reins i I. Cowan) 1953. godine a poboljšanu verziju isti autori izvode 1956. godine. Aparatura se sastojala od nekoliko rezervoara. Dva rezervoara, ispunjena vodom (oko 200 *l* što čini oko 10^{28} protona) i malom količinom rastvorenog $CdCl_2$, bila su rezervoari mete. Detektorski rezervoari bili su ispunjeni nekim organskim scintilatorom. Pretpostavljalo se to da će fluks antineutrina (iz reaktora) koji proleću kroz vodu, pri interakciji sa protonima molekula vode proizvesti, prema relaciji (11.3.22), neutrone i pozitrone. Očekuje se, da za izuzetno kratko vreme, pozitron stupi u uzajamno dejstvo s elektronom (kojih, takođe, ima zbog raspada β^--aktivnih jezgara). Rezultat ovakve interakcije je anihilacija para elektron-pozitron, uz emisiju dva γ-fotona od po 0,51 Mev-a [relacija (11.3.23)] koji bi prodrli kroz metu dajući istovremeno signale u dva scintilaciona detektora postavljena na suprotnim krajevima mete. U međuvremenu, neutron bi prešao manje ili više krivudavu putanju kroz vodu. Statistički posmatrano, nekoliko milionitih delova sekunde posle svog postanka, neutron bi naišao na jezgro kadmijuma (koje ima izuzetno veliki efikasni presek za apsorpciju neutrona), koje bi ga zarobilo. Jedna od posledica zarobljavanja, koje teče u skladu sa nuklearnom reakcijom (11.3.24), bila bi emisija energije od oko 9 MeV-a u vidu 3-4 fotona γ-zraka. Ovi γ-fotoni ušli bi u detektorski rezervoar i izazvali bleskove svetlosti koji se pojavljuju kratko vreme posle onih koji su bili izazvani fotonima nastalim pri anihilaciji para elektron-pozitron. U eksperimentu je koincidentnim merenjem γ kvanata nastalih anihilacijom para pozitron-elektron i γ kvanata koji prate zahvatanje neutrona jezgrom kadmijuma, dokazano postojanje antineutrina:

$$_{48}Cd^{113} + n \rightarrow (_{48}Cd^{114})^* \rightarrow {}_{48}Cd^{114} + \gamma . \qquad (11.3.24)$$

Neutrino, odnosno antineutrino imaju samo jednu od dve moguće orijentacije spina u odnosu na smer impulsa (smer kretanja). Spin antineutrina odgovara okretanju u smeru kazaljke na satu, desni zavrtanj, a vektor spina postavlja se u smeru impulsa. Spin neutrina odgovara okretanju suprotno smeru kazaljke na satu, a vektor spina postavlja se u smeru suprotnom od smera impulsa; helicitet[24] ili heličnost antineutrina je + 1, a neutrina -1, Slika 11.3.4.

[24] Heličnost ili helicitet je veličina sa dve vrednosti, 1 i -1. Helicitet 1 imaju čestice kod kojih vektor spina ima smer impulsa, a čestice čiji spin ima smer suprotan smeru impulsa imaju helicitet -1.

Kao što je pomenuto, neutrino i antineutrino predstavljaju primer **čestice** i **antičestice**. Čestica i antičestica imaju jednake mase i spinove. Električna naelektrisanja su im jednaka po količini, a suprotnog su znaka. Barionski brojevi su im suprotnog znaka osim ako nisu nula, a leptonski brojevi su im, takođe, suprotnog znaka. Iz teorijskih razmatranja nedvosmisleno sledi da su neutrino i antineutrino različiti, da je reč o dve čestice, tačnije, o čestici i antičestici. Ovo je i potvrđeno eksperimentalno, na sledeći način. Uzajamnim dejstvom neutrona i neutrina nastaju proton i elektron:



Slika 11.3.4 Neutrino i antineutrino.

$$v + n \rightarrow p + e\,.$$

Ako bi neutrino i antineutrino bili identični, onda bi mogla da se očekuje i reakcija:

$$\tilde{v} + n \rightarrow p + e\,.$$

Proveravanje mogućnosti odigravanja prethodne nuklearne reakcije izvršeno je tako što je jezgro hlora, ${}_{17}C^{37}$ izloženo fluksu čestica koje prate β^--raspad. Ako bi se pri β^--raspadu oslobađale čestice identične neutrinima, kao rezultat njihove interakcije s jezgrima hlora nastalo bi jezgro ${}_{18}Ar^{37}$. Ovo nije dokazano eksperimentalnim putem, pa zaključujemo da pri β^--raspadu nastaju čestice koje se razlikuju od neutrina. To su antineutrini.

11.4 GAMA-ZRAČENJE

γ-zraci su elektromagnetni talasi koje emituju pobuđena jezgra atoma. Spektar γ-zračenja je diskretan. Znači energijski nivoi jezgra su diskretni, pa se i emisija γ-zraka tumači kao prelaz jezgra iz nekog od postojećih pobuđenih energijskih nivoa u niži nivo. Emitovani γ-fotoni imaju veliku energiju i to od nekoliko desetina keV do nekoliko MeV. γ-zračenje obično prati procese α-ili β-raspada. Kao što smo već istakli, pri α- ili β-raspadu može da nastane jezgro potomak u svom osnovnom ili nekom od svojih pobuđenih stanja. Pobuđeno jezgro obično prelazi u osnovno stanje uz emisiju γ-zračenja. Na primer u ThC (${}_{83}Bi^{212}$) koji prelazi u ThC″ (${}_{81}Tl^{208}$), emitujući α-čestice čije energije mogu da se razvrstaju u pet grupa, rekonstruisaćemo šemu energijskih nivoa jezgra potomka. ThC emituje α-čestice s energijama: 6,0930; 6,0537; 5,7709; 5,6283 i 5,6095 MeV. Pretpostavljajući da se raspad vrši uvek sa određenog nivoa ThC E_0 na različite nivoe ThC″ (E=E_1, E_2, ..), odredićemo, u svakom pojedinom slučaju, energiju raspada prema relaciji:

$$E_0 - E = \frac{m_\alpha \upsilon_\alpha^2}{2} + \frac{M_j \upsilon_j^2}{2} \qquad (11.4.1)$$

gde je m_a masa α-čestice, υ_a brzina α-čestica, M_j masa jezgra potomka, a υ_j brzina uzmaka jezgra potomka. Kako važi zakon o održanju impulsa:

$$m_\alpha \upsilon_\alpha = M_j \upsilon_j \qquad (11.4.2)$$

sledi da je:

$$E_0 - E = \frac{m_\alpha + M_j}{M_j} \cdot \frac{m_\alpha \upsilon_\alpha^2}{2} . \tag{11.4.3}$$

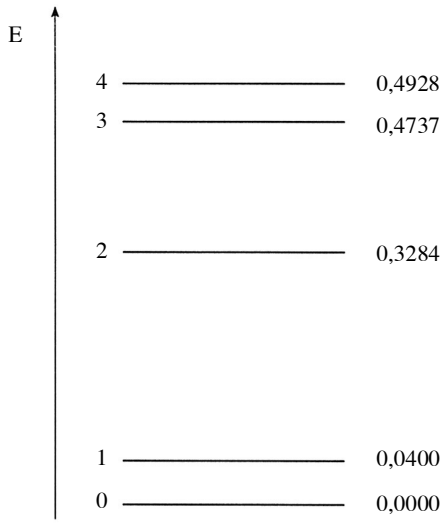
Pomoću jednačine (11.4.3), znajući m_α i M_j, izračunavaju se energije α-raspada koje odgovaraju navedenim vrednostima energije α-čestica. One iznose:

$$\begin{aligned} E_0 - E_1 &= 6{,}2103 \text{ MeV} \\ E_0 - E_2 &= 6{,}1703 \text{ MeV} \\ E_0 - E_3 &= 5{,}8819 \text{ MeV} \\ E_0 - E_4 &= 5{,}7366 \text{ MeV} \\ E_0 - E_5 &= 5{,}7175 \text{ MeV}. \end{aligned} \tag{11.4.4}$$

Sukcesivnim oduzimanjem svake vrednosti $(E_0 - E_i)$ od prethodne a koje su poređane u pet redova prema relaciji (11.4.4), dobijamo razlike energija:

$$\begin{aligned} E_2 - E_1 &= 0{,}0400 \text{ MeV} \\ E_3 - E_1 &= 0{,}3284 \text{ MeV} \\ E_4 - E_1 &= 0{,}4737 \text{ MeV} \\ E_5 - E_1 &= 0{,}4928 \text{ MeV}. \end{aligned} \tag{11.4.5}$$

Neka je $E_1 = 0$, pa se kod ThC″, dobija šema energijskih nivoa prikazana na Slici 11.4.1.



Slika 11.4.1 Šema energijskih nivoa ThC″.

Ako je šema energijskih nivoa ispravno dobijena, onda se, formiranjem razlika između energijskih nivoa, izračunavaju energije γ-fotona koji prate γ-raspad ThC″:[25]

$$h\nu = E_m - E_n . \tag{11.4.6}$$

U Tabeli 11.4.1 prikazane su takve razlike i upoređene su s podacima iz izmerenog γ-spektra ThC″. Od deset razlika šest se poklapa (u granicama eksperimentalne greške) sa energijama γ-kvanata. Očigledno je to da svi prelazi nisu dozvoljeni (prazna mesta u tabeli) i da, kao i kod optičkih prelaza, u atomu važe određena pravila izbora.

Tabela 11.4.1 Izračunate i izmerene energije γ-kvanata

ΔE/MeV		$h\nu_\gamma$
$E_4 - E_3$	0,0191	
$E_4 - E_2$	0,1644	
$E_4 - E_1$	0,4528	
$E_4 - E_0$	0,4928	0,4511
$E_3 - E_2$	0,1453	
$E_3 - E_1$	0,4337	0,4317
$E_3 - E_0$	0,4737	0,4709
$E_2 - E_1$	0,2884	0,2869
$E_2 - E_0$	0,3284	0,3267
$E_1 - E_0$	0,0400	0,0399

Razmotrimo sada uticaj uzmaka jezgra na emisiju emitovanog γ-kvanta. Pretpostavićemo da je jezgro pre emisije mirovalo. Na osnovu važenja zakona o održanju energije i impulsa, energiju uzmaka možemo izračunati pomoću relacija:

$$E = h\nu + \frac{M_j \upsilon_j^2}{2} \tag{11.4.7}$$

$$M_j \upsilon_j = \frac{h\nu}{c}$$

pri čemu je M_j masa jezgra potomka, a υ_j njegova brzina uzmaka dok je E energija toga prelaza. Označimo li sa:

$$\Delta E = E - h\nu$$

razliku energije prelaza i energije γ-kvanta, onda se iz 11.4.7 dobija:

[25] Tačna vrednost γ-kvanta manja je od razlike energija nivoa za iznos energije uzmaka jezgra ($\Delta E = E^2 / 2M_j c^2$, gde je ΔE energija uzmaka, a E energija γ-prelaza; u ovom slučaju ΔE je dosta manje od 1 eV (E=0,04 MeV, $\Delta E = 4,1 \times 10^{-3}$ eV) i daleko prevazilazi tačnost s kojom je određena energija γ-kvanta, pa je u ovom slučaju uticaj uzmaka jezgra zanemaren.

$$\Delta E = \frac{M_j \upsilon_j^2}{2} = \frac{(M_j \upsilon_j)^2}{2M_j} = \frac{h^2 \nu^2}{2M_j c^2} \sim \frac{E^2}{2M_j c^2}. \qquad (11.4.8)$$

Iz jednačine 11.4.8 sledi da je energija γ-kvanta, manja od razlike energije nivoa između kojih se događa prelaz za iznos $E^2/2M_jc^2$, gde je E energija prelaza.

Verovatnoća γ-emisije mogla bi da se izračuna teorijskim putem kada bi bile poznate talasne funkcije jezgra kao rešenje odgovarajuće Šredingerove jednačine. Kako potencijal nuklearnih sila nije tačno poznat, mogu da se izračunaju talasne funkcije koje predstavljaju rešenje Šredingerove jednačine, ali za određeni tip potencijala koji sledi iz usvojenog modela jezgra (pri razmatranju α-raspada pretpostavljeno je, npr., da potencijal jezgra može da se aproksimira jamom s beskonačno visokim zidovima). Prema tome, verovatnoće prelaza mogu da se odrede smao približno i rezultati zavise od primenjenog oblika potencijala. Moguće je, takođe, pokazati da verovatnoća γ-emisije zavisi od vrednosti energija nivoa između kojih se vrši prelaz, od spinova jezgra u početnom i u konačnom stanju, od parnosti nivoa i od multipolnosti prelaza. Kao što česticama pridružujemo moment impulsa $\vec{l}$ koji je kvantovan kvantnim brojem l, tako i foton može da se nalazi u različitim stanjima koja su opisana nekim ukupnim momentom $\vec{L}$ i parnošću II. Tako su kod slobodnog fotona moguća stanja sa ukupnim momentom $|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$ za L=1,2,3 (treba naglasiti da kod fotona ne postoji stanje $L = 0$). Pri tome, svakoj vrednosti momenta $\vec{L}$ odgovara jedno stanje s pozitivnom ili s negativnom parnošću. Tako se stanje s momentom $\vec{L}$ i s parnošću $(-1)^L$ naziva električnim 2^L polom, a stanje s momentom L i s parnošću $(-1)^{L+1}$ naziva se magnetnim 2^L polom. Kada je kvantni broj L=1 onda je to dipol, za L=2 kvadrupol, za L=3 oktupol, itd. Usvojene su sledeće oznake za γ-kvante određene multipolnosti: E1-dipolni kvant; E2-kvadrupolni kvant; M1-magnetni dipol; M2-magnetni kvadrupol, itd. Oznaka E znači električni multipol, a oznaka M magnetni multipol. Stanja električnog dipola i oktupola i magnetnog kvadrupola su neparna, a stanja magnetnog dipola i oktupola i električnog kvadrupola su parna. Ovakvi nazivi (kojima se stanja opisuju kao „multipolna") zasnovani su na klasičnom, a ne na kvantnom pojmu multipola. Ako početno i krajnje stanje jezgra imaju spinove $\vec{I}_i$ i $\vec{I}_f$, nastali γ-foton, pri prelazu jezgra iz početnog u krajnje stanje, odnosi moment $\vec{L}$. Prema zakonu o održanju momenta impulsa važi:

$$\vec{I}_i = \vec{I}_f + \vec{L} \qquad (11.4.9)$$

a za odgovarajuće kvantne brojeve važe jednačine:

$$\begin{aligned} I_i &= I_f + L;\ I_f + L - 1 \ldots I_f - L \Rightarrow \\ L &= I_i - I_f;\ I_i - I_f + 1;\ldots\ldots I_i + I_f \Rightarrow \end{aligned} \qquad (11.4.10)$$

$$|I_i - I_f| \le L \le I_i + I_f.$$

Kao što je pomenuto, iz teorije elektromagnetnog zračenja sledi da vreme poluraspada γ-aktivnog jezgra (odnosno verovatnoće raspada) zavisi od multipolnosti prelaza i od talasne dužine emitovanog γ-zračenja (u krajnjem smislu od energije γ-kvanta). Za električni dipol prelaz EL važi:

$$\frac{1}{T_{1/2}} \sim \frac{1}{\lambda}\left(\frac{R}{\lambda}\right)^{2L} \tag{11.4.11}$$

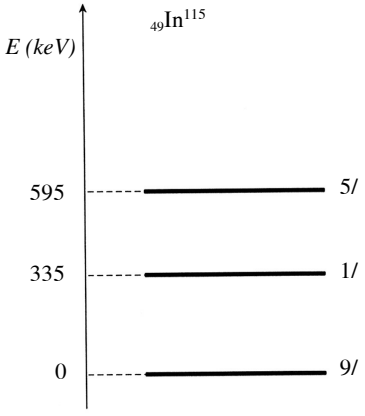
a za magnetni multipolni prelaz važi:

$$\frac{1}{T_{1/2}} \sim \frac{1}{\lambda}\left(\frac{R}{\lambda}\right)^{2(L+1)} \tag{11.4.12}$$

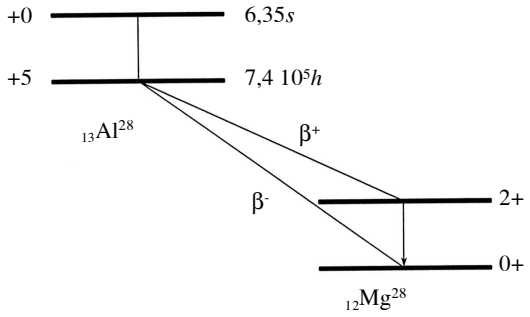
gde je R poluprečnik jezgra, λ talasna dužina emitovanog γ-zračenja (λ kod γ-zračenja kreće se u $2 \times 10^{-10} - 5 \times 10^{-14}$ m), pri čemu je $r/\lambda \ll 1$. Na osnovu jednačina (11.4.11) i (11.4.12) sledi da je verovatnoća prelaza manja (vreme poluraspada veće) za veće L. Prema tome, prelazi visoke multipolnosti obično su zabranjeni ili imaju veliko vreme poluraspada, naročito kod malih energija raspada (veliko λ). Najverovatniji su električni dipolni prelazi. Vremena života najvećeg broja γ-radioaktivnih jezgara su mala i iznose $10^{-7} - 10^{-12}$ sekundi.

11.4.1 Nuklearna izomerija

Nuklearni izomeri su jezgra koja imaju isti redni i maseni broj, a nalaze se u različitim energijskim stanjima. Energijsko stanje jezgra obično je posledica drugih svojstava jezgra, pa nuklearni izomeri mogu da se razlikuju i po vrednosti spina, po tipu raspada i po vremenu poluraspada, po energiji vezivanja, itd. Za razliku od obično pobuđenih jezgara koja imaju vreme poluraspada u opsegu 10^{-7} i 10^{-12} sekundi ($10^{-7} < T_{1/2} < 10^{-12}$ s), pobuđena stanja izomera označavaju se kao metastabilna jer se odlikuju dugim vremenom života i to od nekoliko sekundi, do nekoliko časova



Slika 11.4.2 Šema nuklearnih nivoa $_{49}In^{115}$.



Slika 11.4.3 Primer izomera $_{13}Al^{26}$.

pa i dana. Dugo vreme poluraspada uslovljeno je visokim stepenom zabrane (odnosno malom verovatnoćom) prelaza na energijski niže stanje (koje može da bude osnovno stanje) zbog velike razlike u spinovima. Energijski nivoi izomera, po pravilu, vrlo su bliski. Najveći broj izomera raspoređen je neposredno pored jezgara sa tzv. **magičnim**[26] brojem nukleona, npr. $_{37}Rb^{86}$ koji ima 49 neutrona. Karakteristični primer izomera je i jezgro indijuma $_{49}In^{115}$ čija je šema nivoa prikazana na Slici 11.4.2. Osnovno stanje jezgra $_{49}In^{115}$ ima spin 9/2 i parnost „+". Prvi pobuđeni nivo nalazi se na svega 335 keV i ima spin 1/2 i parnost „-". Prelaz između ovih nivoa je zabranjen, pa je vreme života pobuđenog stanja 14,4 sata. Primer nuklearnog izomera je i $_{13}Al^{28}$, Slika (11.4.3).

11.4.2 Unutrašnja konverzija gama-zračenja

Pobuđeno jezgro obično prelazi u osnovno stanje emisijom γ-kvanta. Drugi način prelaza je proces unutrašnje konverzije γ-zračenja, pri čemu jezgro predaje energiju jednaku energiji pobuđenog stanja jednom od elektrona iz atomskog omotača. Ovaj elektron napušta atom s kinetičkom energijom E_k jednakom:

$$E_k = E - E_0. \tag{11.4.13}$$

gde je E energija pobuđenog stanja jezgra, a E_0 energija veze datog elektrona u atomu. Izbačeni elektron ima strogo određenu energiju, pa kažemo da su elektroni kod unutrašnje konverzije monokinetički pa se po tome razlikuju od elektrona koji se emituju kod β^--emisije, čiji je spektar kontinualan. Obično se iz omotača oslobode *K*-elektroni, mada mogu da budu izbačeni i elektroni iz *L* ili iz *M* sloja, ali s manjom verovatnoćom. Uslov da se dogodi unutrašnja konverzija jeste da je energija pobuđenog stanja jezgra veća od energije veze datog elektrona u atomu. Intenzitet unutrašnje konverzije izražava se koeficijentom unutrašnje konverzije α_k, koji je jednak odnosu verovatnoće emisije konverzionih elektrona w_k i verovatnoće emisije γ-kvanta w_γ:

$$\alpha_k = \frac{w_k}{w_\gamma}. \tag{11.4.14}$$

Koeficijent α_k kreće se u opsegu $10^{-4} < \alpha_k < 10^2$. Veličina α_k jako raste s porastom multipolnosti prelaza a opada sa povećanjem energije prelaza. Kada jezgro u pobuđenom i u osnovnom stanju ima spin nula, tada je jedini način prelaska jezgra iz pobuđenog u osnovno stanje unutrašnjom konverzijom (radijacioni prelaz 0-0 je strogo zabranjen). Tada je $\alpha_k = \infty$ jer je $w_\gamma = 0$. Proces unutrašnje konverzije prati emisija *x*-zračenja. Naime, izbacivanjem konverzionog elektrona, npr. iz *K*-sloja, upražnjava se mesto u *K*-sloju atomskog omotača. To izaziva pregrupisavanje elektrona – njihov prelaz na niža stanja uz emisiju *x*-zračenja. U atomskom omotaču, takođe, moguć je proces sličan unutrašnjoj konverziji γ-zračenja. Tada se umesto emisije *x*-kvanta, ekvivalent energije koji odgovara pobuđenom

[26] Najveću učestanost javljanja na Zemlji, kao i najveću energiju vezivanja po nukleonu imaju jezgra čiji broj protona ili broj neutrona ili maseni broj imaju vrednosti 2, 8, 14, 20, 28, a naročito 50, 82, 126. Ovi brojevi nazvani su magičnim brojevima.

stanju atoma (zbog šupljine u *K*-sloju) predaje nekom od spoljašnjih elektrona atoma koji biva izbačen iz atoma s kinetičkom energijom:

$$E_{kin} = E - E_0$$

gde je E energija pobuđenog stanja atoma, E_0 energija veze datog elektrona u atomu. Elektroni izbačeni na ovaj način iz atomskog omotača zovu se Ožeovi elektroni (videti 7.2.4) i, kao što se vidi iz prethodne jednačine, imaju strogo određenu kinetičku energiju.

11.4.3 Gama-zračenje i nastajanje parova čestica – antičestica

Kada energija pobuđenog stanja jezgra prevazilazi energiju ekvivalentnu dvostrukoj masi elektrona:

$$E > 2m_e c^2 = 1{,}02 \text{ MeV}$$

tada postoji mogućnost nastajanja para čestica – antičestica (npr. elektron-pozitron) na račun energije pobuđenog jezgra. Posmatraćemo sada jedno takvo pobuđeno jezgro koje emituje γ-kvant znatne energije ($E > 2m_e c^2$) a taj kvant se zatim, u električnom polju nekog jezgra ili elektrona, transformiše u par čestica elektron-pozitron. Na osnovu Ajnštajnove relacije o ekvivalenciji mase i energije može se napisati sledeća jednakost:

$$h\nu = 2m_e c^2 + E_k \qquad (11.4.15)$$

kojom se i prikazuje zakon o održanju energije u ovoj transformaciji. Energija γ-kvanta, je hv, $m_e c^2$ je energija mirovanja elektrona, a E_k je višak energije koji preuzimaju elektron i pozitron. Preobražaj γ-kvanta može da se dogodi samo u prisustvu jakog električnog polja ili pri sudaru fotona i neke naelektrisane čestice, pri čemu ona preuzima višak impulsa (prema zakonu o održanju impulsa). Nastajanje para elektron-pozitron još 1934. godine dokazano je snimcima u maglenoj komori. S teorijske tačke gledišta, nastajanje para čestica – antičestica preobražajem γ-kvanta od najvećeg je značaja jer dokazuje mogućnost nastajanja mase (materije) iz energije koju Ajnštajnova relacija i predviđa. U principu, moguće je nastajanje parova čestica – antičestica drugih tipova, npr. proton – antiproton, ali preobražajem fotona odgovarajuće energije. Tako je za nastajanje para proton – antiproton potreban foton čija je energija bar 2 GeV.

Proces suprotan stvaranju para čestica – antičestica predstavlja uzajamno poništavanje (anihilaciju) čestice i antičestice. Parovi čestica – antičestica uzajamno se poništavaju uz nastajanje više fotona ili mezona. Kod para elektron – pozitron pretpostavlja se da kratko vreme postoji kvazistabilan sistem (zbog privlačenja pozitivnog i negativnog naelektrisanja) koji je nazvan **pozitronijum** atom. Istraživanja ovog sistema pokazala su da bi pozitronijum atom mogao da postoji u dva stanja: singuletnom $^1S_0$, u kojem su spinovi elektrona i pozitrona antiparalelni, i u tripletnom $^3S_1$, u kojem su spinovi paralelni. Pozitronijum atom u singuletnom stanju naziva se i para - pozitronijum i ima vrlo kratko trajanje od 8×10^{-9}s. Pozitronijum atom u tripletnom stanju zove se orto-pozitronijum i znatno duže živi, 7×10^{-6}s. Zbog zakona o održanju spina u procesu anihilacije para - pozitronijuma nastaju dva

fotona sa energijom $m_e c^2$ koji se emituju u suprotnim smerovima. Anihilacijom orto-pozitronijuma nastaju tri fotona između kojih se energija od 1,2 MeV deli na proizvoljan način. U principu, anihilacijom orto-pozitronijuma mogao bi da nastane samo jedan foton sa odgovarajućim spinom. Ovo se i dešava ali u znatno manjoj meri. Razlog je u tome što u blizini mora da se nalazi neka (teža) čestica koja bi preuzela preostali impuls.

11.4.4 Teorija pozitrona

Šredingerova jednačina:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{11.4.16}$$

ispravno opisuje evoluciju (promenu s vremenom) sistema koji se kreću brzinama znatno manjim od brzine svetlosti, $\upsilon \ll c$. Za opisivanje sistema koji se kreću brzinama bliskim brzinama svetlosti ovakva jednačina je neprimenljiva. Drugi nedostatak Šredingerove jednačine jeste što ona ne uzima u obzir spin čestica. Oba ova nedostatka mogu da se otklone uvođenjem Dirakove jednačine koja predstavlja uopštavanje Šredingerove jednačine pri relativističkim brzinama. U ovom delu prikazujemo osnovne ideje Dirakove teorije jednog elektrona.

Relativistički izraz za energiju čestice čija je masa mirovanja m_0, naelektrisanje $-e$, impuls $\vec{p}$ i na koju deluju skalarni potencijal φ i vektorski potencijal $\vec{A}$ je:

$$E = \sqrt{m_0^2c^4 + (\vec{p} + e\vec{A})^2c^2} - e\varphi. \tag{11.4.17}$$

Skalarni i vektorski potencijali povezani su s jačinama električnog i magnetnog polja, $\vec{E}$ i $\vec{H}$, redom pomoću jednačina:

$$\vec{E} = -\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - \nabla\varphi \qquad \vec{H} = rot\vec{A}\,. \tag{11.4.18}$$

Prirodno je da se očekuje da ispravan relativistički oblik Šredingerove jednačine može da se dobije uvrštavanjem u jednačinu (11.4.16) kvantnomehaničkog operatora $\hat{H}$. On se dobija na osnovu principa korespondencije iz izraza za energiju (11.4.17), kada se impuls $\vec{p}$ u jednačini (11.4.17) zameni odgovarajućim operatorom (impulsa) $-i\hbar\nabla$, a energija zameni sa $i\hbar\partial/\partial t$:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)\Psi = \sqrt{m_0^2c^4 + (-i\hbar\nabla + e\vec{A})^2c^2}\,\Psi. \tag{11.4.19}$$

Izraz (11.4.19) ima, međutim, dva bitna nedostatka. Prvi je taj što simetrija između prostornih koordinata i vremena (odnosno izvoda po njima, ∇, $\partial/\partial t$, redom) nije izražena onako kako treba da bude u ispravnim relativističkim jednačinama. U relativističkoj teoriji, koordinate x, y i z i vreme t (pomnoženo brzinom svetlosti) uzajamno su povezani i čine nerazdojnu celinu – ove četiri veličine predstavljaju komponente vektora položaja čestice u prostoru i vremenu. Drugi nedostatak jednačine

(11.4.19) jeste kvadratni koren zbog kojeg ova jednačina praktično ne može da se reši. Ovaj problem može da se otkloni ako se umesto od (11.4.17) pođe od izraza:

$$(E + e\varphi)^2 = m_0^2c^4 + (\vec{p} + e\vec{A})^2c^2 \tag{11.4.20}$$

što primenjivanjem principa korespondencije, $\vec{p} \to -i\hbar\nabla$, $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, vodi do tzv. Klajn-Gordonove jednačine:

$$\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)^2 - (-i\hbar\nabla + e\vec{A})^2c^2 - m_0^2c^4\right]\Psi = 0. \tag{11.4.21}$$

Rešavanjem Klajn-Gordonove jednačine dobijaju se, u principu, ispravne energije i talasne funkcije čestica sa spinom jednakim nuli. Međutim, diferencijalna jednačina (11.4.21) je drugog reda po vremenu, pa da bi pomoću nje moglo da se predvidi stanje sistema u nekom trenutku vremena t, potrebno je da se zna ne samo stanje sistema (talasna funkcija Ψ) u početnom trenutku vremena t_0, već i vrednosti $\partial\Psi/\partial t$.

Pri izvođenju relativističke jednačine koja je po njemu i dobila ime, P. A. M. Dirak je pošao od dve pretpostavke:

a) da jednačina koja opisuje evoluciju sistema treba da bude prvog reda po vremenu (kao što je i nerelativistička Šredingerova jednačina),

b) da u ispravnoj relativističkoj jednačini, prostorne koordinate čestice i vreme treba da se pojave u potpuno simetričnom (ekvivalentnom) obliku. Jednačina kretanja koja zadovoljava oba ova uslova ima oblik:

$$\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right) - c\vec{\alpha}(-i\hbar\nabla - e\vec{A}) - \beta m_0c^2\right]\Psi = 0 \tag{11.4.22}$$

pri čemu su $\vec{\alpha}$ i β neki parametri. Karakter ovih parametara Dirak je odredio sledećim rasuđivanjem. U odsustvu polja ($\varphi = 0, \vec{A} = 0$) sve relativističke jednačine kretanja moraju da budu invarijantne u odnosu na Lorencove transformacije, tj. ne smeju da zavise od toga u kojem inercijalnom sistemu se definišu. Posledica toga je da parametri $\vec{\alpha}$ i β ne smeju da zavise od prostornih koordinata i vremena, dakle mogu da deluju samo na spinske koordinate čestica. Drugo, ovi parametri treba da budu izabrani tako, da rešenja Dirakove jednačine za pojedine spinske komponente, zadovoljavaju i Klajn-Gordonovu jednačinu. Pokazalo se da su ovi uslovi ispunjeni samo ako su $\vec{\alpha}$ i β matrice dimenzija 4×4 između kojih postoje određene relacije.

Dirakova jednačina (11.4.22) za elektron predstavlja, dakle, sistem od četiri jednačine čijim se rešavanjem dobijaju četiri talasne funkcije Ψ. Za slobodni elektron dve od njih odgovaraju svojstvenoj vrednosti energije:

$$E = +\sqrt{m_0^2c^4 + \vec{p}^2c^2} \tag{11.4.23}$$

a druge dve energiji:

$$E = -\sqrt{m_0^2c^4 + \vec{p}^2c^2}. \tag{11.4.24}$$

Prema tumačenju koje je dao sam Dirak, rešenja s negativnim svojstvenim vrednostima energije dovode se u vezu sa kretanjem čestice pozitrona čija je masa jednaka masi elektrona, a naelektrisanje jednako ali suprotno po znaku naelektrisanju elektrona. Tako je postavio teoriju pozitrona.

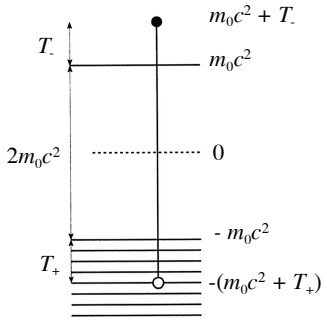
Podrazumeva se da su gotovo sva stanja negativne energije popunjena elektronima i to u skladu s Paulijevim principom isključenja, a to znači po jedan elektron u svakom stanju. Pod posebnim uslovima može da se dogodi da neko od stanja negativne energije ostane nezaposednuto, pa nastaje „šupljina" u stanjima negativne energije. Ove šupljine u stanjima negativne energije su, prema Dirakovom tumačenju, pozitroni.

U skladu s ovim, idealni vakuum bio bi prostor u kojem su sva stanja pozitivne energije slobodna, a sva stanja negativne energije zauzeta, pa bi Maksvelova jednačina imala oblik:

$$\nabla\vec{E} = 0$$

gde je $\vec{E}$ jačina električnog polja. U svim drugim slučajevima Maksvelova jednačina ima oblik:

$$\nabla\vec{E} = \frac{1}{\varepsilon_0}\rho$$



Slika 11.4.4 Prikaz Dirakove teorije pozitrona.

gde je ρ gustina naelektrisanja. Svako zaposednuto stanje pozitivne energije doprinosi ukupnom naelektrisanju sa *-e,* a svaka šupljina u stanju negativne energije doprinosi sa *+e*. Može da se dogodi da elektron iz stanja pozitivne energije pređe u slobodno stanje (šupljinu) negativne energije. U tom slučaju i elektron i pozitron iščezavaju istovremeno uz nastajanje elektromagnetnog zračenja. Obrnuti proces je, takođe, moguć i predstavlja „izbacivanje" elektrona iz stanja negativne energije pod uticajem γ-kvanta velike energije. Kao posledica ovog uzajamnog dejstva nastaju elektron u stanju pozitivne energije i „šupljina" u stanju negativne energije, dakle, par elektron-pozitron. Energija γ-kvanta mora da iznosi bar 1,02 MeV ($2m_ec^2$). Slika 11.4.4 predstavlja prikaz Dirakove teorije pozitrona.

Sam Dirak u jednom predavanju na ovu temu kaže: *„Ako kao zakon prirode prihvatimo gledište o potpunoj simetriji između pozitivnog i negativnog naelektrisanja moramo, tim pre, smatrati više kao slučaj što na Zemlji (a verovatno i u celom Sunčevom sistemu) preovlađuju elektroni i pozitivni protoni. Sasvim je moguće da je na nekim zvezdama obrnuto, i da su te zvezde sagrađene od pozitrona i negativnih protona. Stvarno može biti da je po polovina zvezda od svake vrste. Obe vrste zvezda imale bi iste spektre, i ne bi bilo načina da se razlikuju sadašnjim astronomskim metodama".*

11.4.5 Mesbauerov efekt

DODATAK 11.4

D-11.4.1 Uzmak jezgra pri radioaktivnom raspadu

Održanje energije i impulsa kao univerzalni zakoni važe i prilikom raspada radioaktivnog jezgra. To znači da su energija i moment impulsa jezgra pre raspada jednaki energiji i momentu impulsa svih čestica nastalih u toku raspada:

$$E_{pre} = E_{posle} \tag{D–11.4.1}$$

$$\vec{p}_{pre} = \vec{p}_{posle}. \tag{D–11.4.2}$$

Za vreme raspada jezgro emituje jednu ili više čestica pa se energija raspada raspodeljuje između novonastalih čestica. Očigledno je da će deo energije raspada dobiti i jezgro potomak u obliku kinetičke energije i ta pojava naziva se **uzmak** jezgra.

Posmatraćemo raspad jezgra čija je masa pre raspada M^* i brzina $\vec{\upsilon} = 0$. Energija raspada je E_r, a energija γ-fotona je $E_\gamma = h\nu$. Kako se deo energije troši na uzmak jezgra, $E_r \neq E_\gamma$. Pre raspada impuls jezgra bio je jednak nuli. Posle raspada masa jezgra je $M(M < M^*)$, a brzina $\vec{\upsilon}$ tako da iz zakona o održanju energije sledi:

$$E_r = E_\gamma + E_{uz}. \tag{D–11.4.3}$$

Pošto je impuls jezgra pre emisije γ-kvanta bio jednak nuli, na osnovu zakona o održanju impulsa sledi:

$$0 = \vec{p}_j + \vec{p}_\gamma \tag{D–11.4.4}$$

a kako se jezgro i γ-kvant posle emisije kreću u suprotnim smerovima:

$$|\vec{p}_j| = |\vec{p}_\gamma|. \tag{D–11.4.5}$$

Intezitet impulsa jezgra posle γ-raspada je $p_j = M\upsilon$, a impuls fotona je prema (D–7.3.7):

$$p_\gamma = \frac{E_\gamma}{c}.$$

Na osnovu jednakosti (D–11.4.5) sledi da je brzina jezgra υ:

$$\upsilon = \frac{E_\gamma}{Mc} \tag{D–11.4.6}$$

Energija uzmaka, E_{uz} je, prema tome:

$$E_{uz} = \frac{m\upsilon^2}{2} = \frac{E_\gamma^2}{2Mc^2}. \tag{D–11.4.7}$$

D-11.4.2 Doplerov efekt

Doplerov efekt je pojava promene frekvencije emitovanih talasa usled relativnog kretanja njihovog izvora u odnosu na detektor (posmatrača).

Razmatraćemo, ponovo, emisiju γ-fotona, ovog puta iz jezgra koje pre raspada ima brzinu $\vec{\upsilon}_0$. Tada je impuls jezgra pre raspada:

$$\vec{p}_j = M^*\vec{\upsilon}_0 = (M + m_\gamma)\vec{\upsilon}_0. \qquad \text{(D–11.4.8)}$$

Ovde je masa pobuđenog jezgra M^* predstavljena kao zbir mase jezgra u osnovnom stanju i mase fotona. To ne znači da foton u jezgru postoji kao čestica nego samo da će se deo mase pobuđenog jezgra pretvoriti u energiju fotona koja je ovde formalno izražena preko njegove (relativističke) mase.

Ako se γ-foton emituje pod uglom θ u odnosu na pravac kretanja jezgra, Slika D–11.4.1, onda je komponenta impulsa u pravcu koji je definisan tim uglom:

$$p_\theta = (M + m_\gamma)\upsilon_0\cos\theta = M\upsilon_0\cos\theta + m_\gamma\upsilon_0\cos\theta = p_{\theta,j} + p_{\theta,\gamma}\ . \qquad \text{(D–11.4.9)}$$

Impuls γ-fotona emitovanog iz jezgra u pokretu jednak je zbiru impulsa koji bi foton imao da je jezgro pri emisiji mirovalo i impulsu fotona „dok je bio u jezgru" $(p_{\theta,\gamma})$ iz jednačine (D–11.4.9):

$$p_\gamma = p_\gamma^0 + m_\gamma\upsilon_0\cos\theta. \qquad \text{(D–11.4.10)}$$

Odavde se, neposredno, dobija relativna promena impulsa fotona usled kretanja izvora:

$$p_\gamma - p_\gamma^0 = m_\gamma\upsilon_0\cos\theta \quad \Rightarrow \quad \Delta p_\gamma = m_\gamma\upsilon_0\cos\theta. \qquad \text{(D–11.4.11)}$$

Ako se masa m_γ izrazi preko impulsa fotona, jednačina (D–11.4.5), dobija se:

$$m_\gamma = \frac{p_\gamma}{c} \qquad \text{(D–11.4.12)}$$

pa je:

$$\Delta p_\gamma = \frac{p_\gamma}{c}\upsilon_0\cos\theta \ \Rightarrow \ \frac{\Delta p_\gamma}{p_\gamma} = \frac{\upsilon_0}{c}\cos\theta. \qquad \text{(D–11.4.13)}$$

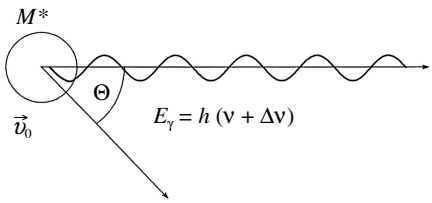
Doplerov efekt, tj. promena frekvencije emitovanog γ-zračenja (fotona) usled kretanja izvora dobija se izražavanjem impulsa p preko energije E odnosno frekvencije:

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta p}{p} = \frac{\upsilon_0}{c}\cos\theta. \qquad \text{(D–11.4.14)}$$

Kada se jezgro kreće u smeru emisije fotona, $\theta = 0$, $\cos\theta = 1$:

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{\upsilon_0}{c} \qquad \text{(D–11.4.15)}$$

Doplerov efekt ima veliki značaj u spektroskopiji. Frekvencija zračenja koju emituju atomi ili molekuli zavisi od brzine njihovog kretanja u pravcu emisije svetlosti. Pri usmerenom kretanju centara emisije (npr. atomi u zvezdama, maglinama i u drugim nebeskim telima) dolazi do pomeranja položaja spektralnih linija, što se koristi za merenje brzine nebeskih tela. Haotično, termalno kretanje atoma i molekula koji zrače dovodi do širenja njihovih spektralnih linija, na osnovu čega može da se odredi raspodela njihovih brzina i čitav niz drugih fizičkohemijskih podataka.



Slika D-11.4.1 Na emitovani γ-foton prenosi se komponenta impulsa paralelna sa impulsom fotona.

D-11.4.3 Širina spektralnih linija

Na širinu sprektralne linije, pored Doplerovog efekta, utiče i vreme života pobuđenih stanja, τ. Elektromagnetni talas (fotoni) emituje se iz nekog sistema kada sistem iz pobuđenog stanja prelazi u stanje niže energije. Do prelaza u niže stanje dolazi usled spontane težnje sistema da postigne stanje minimalne energije. Sistem spontano, bez ikakvog spoljnjeg uticaja, prelazi iz pobuđenog u stanje niže energije. Stabilnost pobuđenog stanja može da se opiše njegovim srednjim vremenom života kao što se, na isti način, nestabilno (radioaktivno jezgro) opisuje srednjim vremenom života. Prema Hajzenbergovoj relaciji neodređenosti, stabilnost energijskog stanja (tačnije srednje vreme života, τ), i neodređenost tog stanja ΔE, povezani su izrazom:

$$\Delta E \cdot \tau \approx h \tag{D-11.4.16}$$

odnosno:

$$\Delta E = \Gamma = \frac{h}{\tau}. \tag{D-11.4.17}$$

Iz jednačine (D-11.4.17) očigledno je da skraćivanjem života pobuđenog stanja dolazi do porasta neodređenosti njegove energije. To znači da zračenje emitovano pri prelasku atoma ili molekula iz jednog takvog, nestabilnog pobuđenog stanja nema strogo definisanu frekvenciju nego postoji raspodela frekvencija u širem ili u užem području, tj. spektralna linija ima konačnu širinu. Ako se umesto ΔE u (D-11.4.16) zameni $h\Delta\nu$ ($E = h\Delta\nu$) dobija se:

$$\Delta\nu = \frac{1}{\tau}. \tag{D-11.4.18}$$

Znači, širina spektralne linije, $\Delta\nu$ (ili Γ u jedinicama energije) obrnuto je proporcionalna vremenu života pobuđenog stanja. (Podrazumeva se da je vreme života osnovnog stanja, mnogo, mnogo duže.)

U optici je dobro poznata pojava **rezonantne** apsorpcije svetlosti. Atom ili molekul, koji se nalaze u pobuđenom stanju (n), pri prelasku iz višeg stanja n u niže stanje m emituju foton. Isti takav atom ili molekul, koji je već u nižem stanju (m), apsorbuje takav foton i posle apsorpcije prelazi u odgovarajuće više stanje, n. U principu, pojava rezonantne apsorpcije trebalo bi da se opazi i kod emisije i apsorpcije γ-zraka, tj. kod γ-radioaktivnih jezgara. Drugo jezgro, koje se nalazi u osnovnom stanju moglo bi da apsorbuje takav γ-foton koji je emitovan iz pobuđenog jezgra. Međutim, pod normalnim uslovima rezonantna apsorpcija γ-fotona se ne opaža, što je neposredna posledica uzmaka jezgra do kojeg dolazi prilikom γ-raspada. Deo energije prelaza, E_R, troši se na uzmak jezgra, tako da je $E_R > E_\gamma$ odnosno saglasno jednačini (D-11.4.3):

$$E_\gamma = E_R - E_{uz}. \tag{11.4.25a}$$

Na potpuno isti način kao kod emisije fotona i prilikom apsorpcije fotona dolazi do uzmaka jezgra. Stoga foton, koji bi mogao da bude apsorbovan jezgrom iste vrste, mora da ima energiju veću od energije prelaza, E_R:

$$E_\gamma = E_R + E_{uz} \tag{11.4.25b}$$

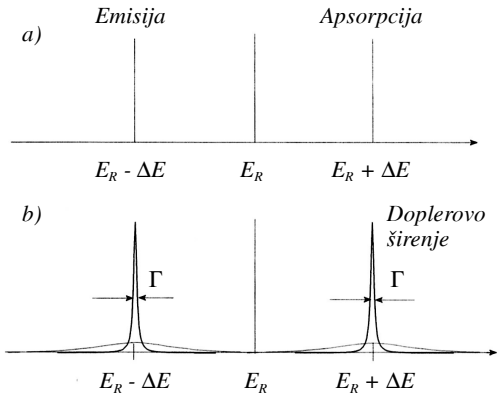
što je šematski prikazano na Slici 11.4.5. U realnom slučaju, vreme života pobuđenog stanja, τ, je konačno, pa saglasno izrazu (D-11.4.17) energija apsorbovanog ili emitovanog fotona nije tačno određena već se proteže u intervalu Γ:

$$\Gamma = \frac{h}{\tau}. \tag{11.4.26}$$

Do rezonantne apsorpcije dolazi ako se energije emitovanog i apsorbovanog fotona bar delimično poklapaju. Uslov za rezonantnu apsorpciju dobija se upoređivanjem energije uzmaka sa širinom spektralne linije. Sa Slike 11.4.5 očigledno je to da do rezonantne apsorpcije dolazi samo ako je pomak energije fotona (energija uzmaka), ΔE, manji od širine nivoa pobuđenog stanja, Γ:

$$\Delta E < \Gamma. \tag{11.4.27}$$

Za optičke rezonantne prelaze ovaj uslov je uvek ispunjen, pošto je energija prelaza relativno mala ($E_R \sim 10$ eV), pa je, saglasno jednačini (D-11.4.7), i energija uzmaka mala - praktično zanemarljiva u odnosu na prirodnu širinu linije. Međutim, za γ-zračenje E_R je veliko ($E_R \sim 1$ MeV) i pošto energija uzmaka zavisi od kvadrata energije fotona, velika je i energija uzmaka, ΔE. Pored toga, pobuđena nuklearna stanja su relativno stabilna. Zbog toga je $\Gamma << \Delta E$, što protivreči rezonantnom uslovu (11.4.27), pa je i rezonantna apsorpcija praktično nemoguća. Jedina mogućnost da ipak dođe do rezonantne apsorpcije γ-zračenja jeste da se jezgra kreću haotično velikim brzinama. Tada Doplerovo širenje spektralnih linija može da dovede do delimičnog preklapanja emisione i apsorpcione spektralne linije, tj. do ispunjenja uslova (11.4.27), Slika 11.4.5 b.



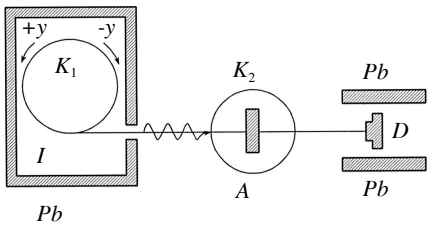
Slika 11.4.5 Emisija i apsorpcija γ-fotona. Usled uzmaka jezgra, energija γ-fotona manja je od energije prelaza E_R, a energija fotona koju jezgro iste vrste može da apsorbuje mora da bude veća (takođe zbog uzmaka) od energije prelaza, E_R: a) idealni slučaj kada je vreme života pobuđenog stanja beskonačno. Emisiona i apsorpciona spektralna linija γ-zračenja su beskonačno uske; b) realni slučaj. Vreme života pobuđenog stanja je konačno, pa otuda i emisiona i apsorpciona spektralna linija γ-zračenja imaju konačne širine.

Nemački fizičar Rudolf Mesbauer 1958. godine predložio je način da se rezonantna apsorpcija γ-zračenja ipak ostvari. Kao emiteri i apsorberi uzimaju se, umesto slobodnih jezgara, jezgra čvrsto vezana u kristalnu rešetku. Čak i tada, najveći broj jezgara uzmiče, kako pri emisiji tako i pri apsorpciji fotona. Međutim, pod pogodnim uslovima moguće je postići da se impuls uzmaka prenese na kristal kao celinu, tačnije na makroskopsku grupu atoma (kojih može da bude do 10^8), a ne na pojedinačno jezgro. Tada u jednačini (D-11.4.7) masa M postaje ogromna, pa je i prenošenje energije uzmakom neznatno. Naravno, atomi u kristalnoj rešetki mogu da se nalaze u različitim (kvantovanim) oscilatornim stanjima koja mogu da se pobude energijom uzmaka, pod uslovom da je ona veća od oscilatornog kvanta. Tada masa M, u imeniocu izraza za energiju uzmaka, odgovara masi pojedinačnog atoma u kristalnoj rešetki. Pobuđivanje oscilatornih nivoa atoma kristalne rešetke smanjuje verovatnoću rezonantne apsorpcije γ-zračenja. Mesbauer je eksperimentalnim i teorijskim putem ispitao i odredio uslove pod kojima se γ-prelazi dešavaju uz minimalnu energiju uzmaka. Jedan takav bitan uslov ima oblik:

$$\frac{E_\gamma^2}{2Mc^2} < k\theta\,; \qquad \theta = \frac{h\nu_m}{k} \tag{11.4.28}$$

pri čemu je k Bolcmanova konstanta, a ν_m frekvencija kojom osciluje najveći broj atoma kristalne rešetke na datoj temperaturi T. Ovaj uslov ograničava opažanje rezonantne apsorpcije na γ-kvante relativno niske energije i to od oko 150 keV. Kada je energija uzmaka (M u imeniocu izraza za energiju uzmaka predstavlja masu atoma) mala u poređenju sa $k\theta$ pobuđivanje oscilatornih stanja atoma rešetke ne dešava se pri emisiji γ-kvanta. Kristal kao celina uzmiče, zbog čega je ovakva energija uzmaka minimalna i moguća je rezonantna apsorpcija i na sobnim temperaturama. Kada je energija uzmaka uporediva sa $k\theta$, snižavanjem temperature mogu da se postignu uslovi za snižavanje verovatnoće pobuđivanja oscilatornih stanja atoma kristalne rešetke.

Na Slici 11.4.6 prikazana je šema Mesbauerovog ogleda kojim je potvrđena ispravnost objašnjenja efekta rezonantne apsorpcije. Kao izvor γ-zračenja korišćen je Ir sa energijom od 129 keV. Na Slici 11.4.6, I je izvor γ-zračenja, A je apsorber (isti izotop iridijuma ali u osnovnom stanju) i D detektor γ-zračenja. Izvor i apsorber nalaze se u kriostatima K_1 i K_2 na temperaturi od 87 K. Okretanjem kriostata K, izvoru može da se saopšti brzina $\pm\,\upsilon$. U ogledu je merena zavisnost broja registrovanih γ-fotona od brzine kretanja izvora. Odgovarajuća eksperimentalna kriva prikazana je na Slici 11.4.7. Na apscisu je naneta relativna brzina izvora u odnosu na apsorber, i odgovarajuća promena energije fotona zbog Doplerovog efekta, jednačina (D-11.4.15):



Slika 11.4.6 Mesbauerov ogled. Izvor, I i apsorber, A nalaze se u kriostatima K_1 i K_2, redom. Izvoru može da se saopšti brzina $\pm\,\upsilon$. Detektor D detektuje neapsorbovane fotone.

$$\Delta E = \upsilon\frac{E}{c}\,. \tag{D-11.4.29}$$

Na ordinatu je nanet intenzitet γ-zračenja koje je prošlo kroz apsorber. Pri nultoj brzini, položaji emisione i apsorpcione linije se poklapaju i opaža se intenzivna rezonantna apsorpcija. Međutim, pri brzinama od nekoliko santimetara u sekundi, što odgovara promeni energije od $\Delta E \sim 10^{-5}$ eV, rezonancija je potpuno narušena i do apsorpcije praktično ne dolazi.

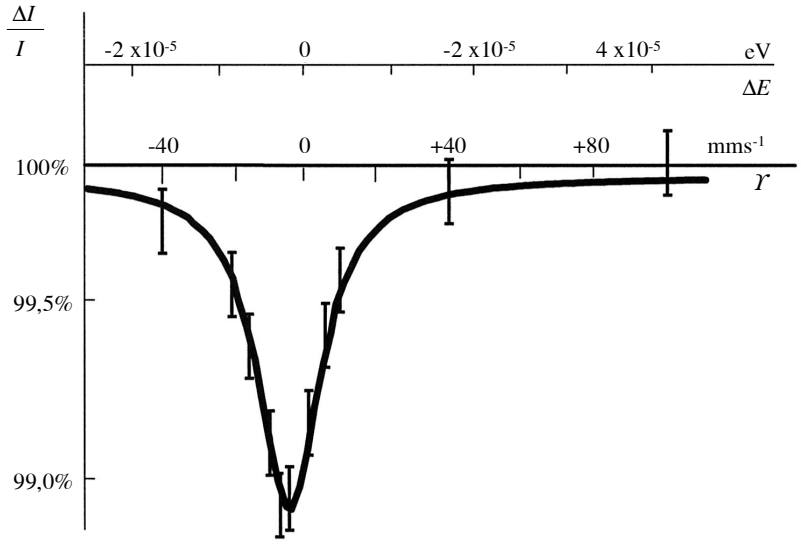
Mesbauerov efekt je jedinstven pošto omogućava merenje izvanredno malih energijskih razlika. Odnos Γ/E predstavlja meru tačnosti metode i za Ir^{191} iznosi 4×10^{-11}. U drugim slučajevima ovaj odnos je reda veličine 10^{-15} - 10^{-17} (što bi odgovaralo merenju rastojanja od Zemlje do Meseca sa tačnošću od nekoliko nanometara).

Ovo je omogućilo da se izmeri „crveni" pomak koji je predskazao Ajnštajn opštom teorijom relativnosti. Suština efekta sastoji se u tome da se promenom gravitacionog potencijala menja i frekvencija emitovanog zračenja. Ovo je lako razumeti kada se energija fotona izrazi preko njegove efektivne mase:

$$E = mc^2. \tag{11.4.30}$$

Ako se foton kreće vertikalno naviše u Zemljinom gravitacionom polju, tada se pri promeni visine za iznos H, njegova energija promeni za iznos ΔE:

$$\Delta E = mgH \tag{11.4.31}$$



Slika 11.4.7 Mesbauerov spektar iridijuma. Pošto su emiter i apsorber γ-fotona u kriostatu, energija uzmaka je zanemarljivo mala, pa se rezonantna apsorpcija dešava i bez relativnog kretanja izvora i apsorbera.

kao i za materijalno telo s masom mirovanja m. Deljenjem jednačina (11.4.30) i (11.4.31) uz $E = h\nu$, dobija se izraz za „crveni" pomak:

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta \nu}{\nu} = \frac{gH}{c^2}. \qquad (11.4.32)$$

Pri $H = 30$ m, izraz (11.4.32) ima vrednost 3×10^{-15} i može da se tačno izmeri Mesbauerovim efektom. Izvedeni eksperimenti (izvor na 30 m iznad apsorbera, tako da se γ-fotoni kreću nasuprot gravitacionom polju) u potpunosti su potvrdili valjanost izraza (11.4.32).

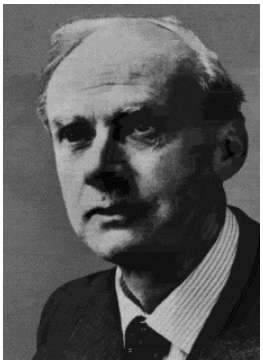
Anri Bekerel (Antoine Henry Becquerel, 1852–1908), potiče iz porodice naučnika. Njegov otac, Aleksandar Bekerel, proučavao je fluorescenciju i fosforescenciju, kao i uticaj Sunčeve svetlosti na ove fenomene, dok se njegov deda (Antoine Cesar) bavio elektrohemijom i izumeo elektrolitički metod za ekstrakciju metala iz ruda. Anri Bekerel je uz oca zavoleo nauku i od njega nasledio minerale i kristale koje je njegov otac proučavao. Tako je Anri Bekerel i otkrio, ispitujući eventualnu fluorescenciju uranovih soli, da uranova jedinjenja spontano, bez ikakvog spoljašnjeg uticaja, emituju zračenje koje deluje na fotoploču. Za ovo otkriće, 1903. godine, zajedno sa M. i P. Kiri, nagrađen je Nobelovom nagradom za fiziku.

Marija Kiri (Marie Sklodowska-Curie, 1867–1934), rođena je u Varšavi u Poljskoj. Sa dvadeset i četiri godine ostvaruje svoju veliku želju i odlazi u Pariz da studira fiziku i matematiku na čuvenoj Sorboni. Studije završava za tri godine, udaje se za fizičara Pjera Kirija (Pierre Curie, 1859–1906), a u okviru teme za doktorat odlučuje se da ispita uzrok pojave misterioznog zračenja koji je otkrio Anri Bekerel. Zajedno sa mužem Pjerom ispituje intenzitet zračenja (aktivnost) različitih uranijumovih jedinjenja na osnovu njihove jonizujuće sposobnosti, pomoću jednostavnih elektrometara. Utvrđuju da neke rude urana, npr. pehblenda, mnogo intenzivnije zrače, pa već u junu 1898. objavljuju da imaju jake razloge da veruju da ruda pehblenda sadrži do tada nepoznati metal, osobina sličnih bizmutu, koji veoma intenzivno zrači i predlažu da se on nazove *polonijum* „po imenu domovine jednoga od nas". Decembra 1898. objavljuju otkriće još jednog do tada nepoznatog elementa velike aktivnosti, po osobinama sličnog barijumu a koga takođe sadrži pehblenda. Predlažu da se ovaj novi element nazove radijum. Godine 1903. M. Kiri, P. Kiri i A. Bekerel dobijaju Nobelovu nagradu za fiziku za zajednički rad na ispitivanju pojave zračenja koju je otkrio profesor Bekerel. Godine 1911. M. Kiri dobija Nobelovu nagradu za hemiju za svoje zasluge za unapređenje hemije otkrićem elemenata radijuma i polonijuma, za utvrđivanje prirode radijuma i njegovo izolovanje u metalnom stanju, i za istraživanje jedinjenja toga značajnog elementa.

Marija Kiri će ostati upamćena i kao prva žena profesor na Sorboni (postala je profesor 1908. godine) i prva žena šef katedre za fiziku. Godine 1914. osnovaće i Institut za radijum u Parizu.

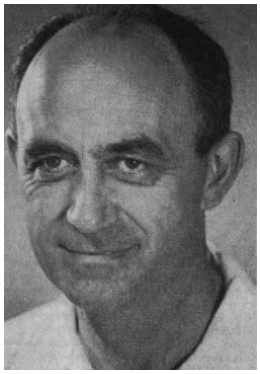
Pjer Kiri (Pierre Curie, 1859–1906), rođen je u Parizu. Studirao je fiziku na Sorboni, a 1900. postao je i profesor na tom čuvenom univerzitetu. Rano je počeo da se bavi kristalografijom i zajedno sa bratom Žakom (Jacques Curie) otkrio je piezoelektrični efekt. Kasnije je svojim radovima unapredio teoriju simetrije a proučavao je i magnetizam supstancija. Pokazao je da

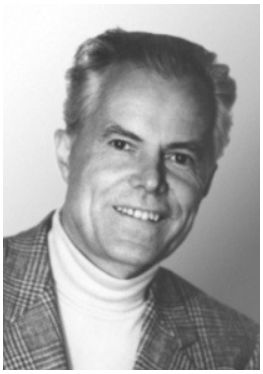
se magnetne osobine nekih supstancija menjaju na određenoj temperaturi. Ta temperatura se po P. Kiriju danas naziva Kirijeva tačka. Bio je vrlo vešt eksperimentator. Konstruisao je sofisticirane instrumente ili delove instrumenata, osetljive elektrometre, uređaje na bazi piezoelektriciteta. Sa Marijom Kiri otkriće kasnje poreklo radioaktivnosti i nove elemente – polonijum i radijum. Zajedno sa Anri Bekerelom i Marijom Kiri dobio je, 1903. godine, Nobelovu nagradu za fiziku.



Pol Adrijen Moris Dirak (Paul Adrien Maurice Dirac, 1902–1984), rođen je u Bristolu, gde je studirao, a diplomirao 1926. godine na Kembridžu. Od 1932. do 1969. godine bio je profesor na Kembridžu. Dirak je značajno doprineo razvoju kvantne mehanike proširujući je u domen relativističkih efekata, pa je tako, 1928. godine, predskazao postojanje pozitrona. Godine 1933. dobio je sa E. Šredingerom Nobelovu nagradu za fiziku za otkriće novih produktivih oblika atomske teorije.

Enriko Fermi (Enrico Fermi, 1901–1954), rođen je u Rimu, a bio je profesor u Firenci i Rimu pre nego što je emigrirao u SAD 1939. godine. Bio je profesor na Kolumbija univerzitetu u Njujorku i na Univerzitetu u Čikagu. Formulisao je kvantnu statistiku, koja je po njemu dobila ime (Fermijeva statistika). Godine 1938. dobio je Nobelovu nagradu za fiziku za otkriće novih radioaktivnih elemenata stvorenih neutronskim ozračivanjem, i za pronalazak nuklearnih reakcija izazvanih sporim neutronima. Za vreme II svetskog rata bio je uključen u projekt iskorišćenja atomske energije i pod njegovim rukovodstvom izvedna je prva kontrolisana lančana reakcija u Čikagu 2. 12. 1942.





Rudolf Ludvig Mesbauer (Rudolf Ludwig Mössbauer), rođen je 1929. u Minhenu, gde je završio srednju školu, kao i studije na Tehničkom univerzitetu, 1954. godine. Od 1955. do 1957. radi na doktorskoj tezi izvodeći seriju eksperimenata u Institutu za fiziku Maks Plankovog Instituta za medicinska istraživanja u Hajdelbergu. Tada izvodi i prve eksperimente u kojima nastaje rezonantna apsorpcija gama-zračenja kod atoma vezanih u kristalnu rešetku a ovaj fenomen Mesbauer objašnjava i teorijski. Ostvarenjem rezonantne apsorpcije gama-zračenja otvara se put za određivanje važnih osobina čvrstih tela i finih efekata u njima. Mesbauer 1961. godine, sa R. Hofstadterom, dobija Nobelovu nagradu za fiziku za istraživanja rezonantne apsorpcije gama-zračenja. Otada i taj efekt nosi njegovo ime.

12. SUBATOMSKE ČESTICE

„Da sam hteo da pamtim imena svih čestica bio bih botaničar."
Enriko Fermi

Pored elektrona, protona i neutrona kao (materijalnih) čestica i fotona kao osnovnog kvanta energije, u proteklih sto godina otkriveno je na stotine drugih čestica. Dugo se verovalo da su nove čestice elementarne, tj. da se ne mogu razložiti na prostije sastojke, ali se vremenom pokazalo da je najveći broj čestica složen. Uprkos tome, naziv elementarne čestice zadržao se, sada u novom, proširenom značenju. Isto tako, drugi uobičajeni naziv, subatomske čestice, izveden iz činjenice da su nove čestice manje od atoma, strogo uzevši, nije ispravan, jer mase nekih čestica višestruko prevazilaze mase lakših hemijskih elemenata. Nazivi elementarne ili subatomske čestice zadržali su se do današnjih dana kao sinonimi za čestice bez obzira na njihovu složenost i masu.

12.1 ISTORIJSKI OSVRT

Elektron je prva elementarna čestica otkrivena pre više od 100 godina. Kako je već detaljno opisano u drugom poglavlju, Dž. Dž. Tomson je 1897. godine u eksperimentima sa katodnim zracima odredio naelektrisanje i masu elektrona. Usledila su, zatim, otkrića α-čestice (Raderford, 1899), protona (Radarford, 1919), i neutrona (Čedvik, 1931). Tako su početkom tridesetih godina bili poznati osnovni sastojci materije, elektroni, protoni i neutroni. Međutim, mnoga pitanja su i dalje ostala bez odgovora: kakva je priroda jakih sila koje drže nukleone u jezgru? Kako to da je spektar elektrona prilikom β-raspada kontinualan? Postoje li antičestice koje predviđa Dirakova teorija? Svaka od ovih misterija na kraju je razrešena otkrićem još jedne nove čestice.

Da bi objasnio kontinualni spektar elektrona pri β-raspadu Pauli je pretpostavio postojanje neutralne čestice, neutrina, koja je ubrzo i eksperimentalno otkrivena. Anderson otkriva pozitron već 1932. godine, a otprilike u isto vreme Jukava predviđa postojanje nove čestice, piona, kao prenosioca sile među nukleonima u jezgru. Zaista, 1937. godine u kosmičkim zracima pronađena je čestica s osobinama koje je predvideo Jukava, ali se nakon deset godina ispostavilo da je ta nova čestica mion. Jukavin pion eksperimentalno je otkriven tek 1947. godine.

Posle pronalaska piona usledila su otkrića mezona K^+, π^0, K^0, kao i hiperona Λ^0. Razvoj akceleratora u ranim pedesetim godinama doveo je do „populacione eksplozije" čestica. U to doba pronađeni su barioni Δ, $\Sigma^{\pm}$, Ξ^-, Σ^0, Ξ^0, kao i antiproton i antineutron... U ranim šezdesetim godinama otkriveno je još mnoštvo mezona (ρ, ω, η, K^*, ϕ, f, a_2, i η') uz još više bariona. Do danas je eksperimentalno opaženo preko 150 čestica.

Takvo mnoštvo čestica predstavljalo je pravu moru za istraživače (vest o otkriću mezona Rabi je prokomentarisao pitanjem „Ko je to poručio?") što je podstaklo potragu za dubljom vezom među njima. Kao kruna tih napora pojavio se model kvarka (koji su nezavisno predložili Gel-Man i Cvajg, 1964. godine) na kojem se zasniva „standardni model". Standardni model je u saglasnosti sa svim do sada izvedenim eksperimentima.

Opažene čestice mogu se svrstati u dve osnovne klase – materijalne čestice i bozone polja. Materijalne čestice, se dele na leptone, mezone i barione, Tabela 12.1.1.

Tabela 12.1.1 Familije čestica

Familija		Struktura	Interakcije	Spin	Primeri
Leptoni		Osnovna	Slaba, el. mag. (EM)	Poluceo	e,ν
Mezoni	Hadroni	Složena	Slaba, EM, jaka	Celobrojni	π,K
Barioni	Hadroni	Složena	Slaba, EM, jaka	Poluceo	*p, n*
Bozoni polja		Osnovna	Slaba, EM, jaka	Celobrojni	γ,W,Z

Leptoni su čestice slične elektronu, imaju spin 1/2 i ne podležu delovanju jake sile. Postoje tri naelektrisana leptona, elektron, mion i tau lepton i tri odgovarajuća neutralna leptona–neutrina, elektronski, mionski i tau neutrino.

Mezoni i barioni (zajedničko ime–hadroni) učestvuju u jakim interakcijama. Međusobno se razlikuju po tome što mezoni imaju celobrojni spinski kvantni broj (0, 1, ...) dok je spinski kvantni broj bariona poluceo (1/2, 3/2, ...). Najpoznatiji barioni su proton i neutron; svi ostali barioni su kratkoživeći. Najpoznatiji mezon je pion (π-mezon); njegovo srednje vreme života je $2{,}6 \times 10^{-8}$s, dok se svi ostali mezoni raspadaju znatno brže.

Najveći broj detektovanih čestica (preko 150) su hadroni (mezoni i barioni). Situaciju pre formulacije standardnog modela najbolje odslikava Fermijev stav citiran u podnaslovu ovog poglavlja. Standardnim modelom je u velikoj meri razjašnjena situacija. Prema tom medelu, hadroni se sastoje od kvarkova, čestica sa spinskim kvantnim brojem 1/2. U sastav mezona ulaze kvark i antikvark, dok su barioni sastavljeni od tri kvarka. Prema standardnom modelu postoji samo 12 elementarnih čestica koje su svrstane u tri „generacije", Tabela 12.1.2. Prvu generaciju čine u-kvark, d-kvark, elektron i elektronski neutrino. Ove čestice sačinjavaju celokupnu materiju koja nas okružuje. Drugu generaciju čine c-kvark, s-kvark, mion i mionski neutrinom, a treću, t-kvark, b-kvark, tauon i tau neutrino. Svaka od 12 elementarnih čestica ima odgovarajuću antičesticu.

Prema kvantnoj teoriji polja, čestice intereaguju razmenom bozona polja, koji su, takođe, čestice. Najpoznatiji bozon polja je foton koji je nosilac elektromagnetne interakcije. Postoji još i osam gluona pomoću kojih se ostvaruje jaka interakcija, dok

slabu interakciju prenose bozoni polja W^+, W^- i Z^0. Relativni odnosi među česticama prikazani su u Tabeli 12.1.2.

Tabela 12.1.2 Osnovne osobine i veza među česticama po standardnom modelu

Osnovne čestice materije				
Naelektrisanje	1. generacija	2. generacija	3. generacija	
		leptoni		
-1	elektron (e)	mion (μ)	tauon (τ)	plus antičestice
0	el. neutrino (ν_e)	μ neutrino (ν_μ)	τ neutrino (ν_τ)	
		kvarkovi		
2/3	u-kvark	c-kvark	t-kvark	plus antičestice
-1/3	d-kvark	s-kvark	b-kvark	
		bozoni polja		sila
0		foton		elektromagnetna
0		gluoni (8)		jaka sila
+1, -1		W^+, W^-		slaba sila
0		Z^0		slaba sila

12.2 OSNOVNE SILE

Da bi se razumele osobine čestica, treba znati sile koje deluju među njima. Sve poznate interakcije mogu se opisati preko delovanja četiri osnovne sile: **gravitacione, nuklearne slabe, elektromagnetne** i **nuklearne jake sile.** Pošto se silama mogu pridružiti odgovarajuća polja, u literaturi se zavisno od konteksta, sreću nazivi osnovne sile (gravitaciona, slaba, elektromagnetna i jaka), osnovne interakcije (gravitaciona, slaba, elektromagnetna i jaka) ili osnovna polja (gravitaciono, slabo, elektromagnetno i jako).

Čestice međusobno mogu delovati jedna na drugu, izazivajući raspad ili reakciju, preko bilo koje od osnovnih sila. Tabela 12.2.1 pokazuje kojim silama čestice mogu delovati jedna na drugu. Sve čestice intereaguju gravitacionim i slabim silama. Manji deo intereaguje elektromagnetnom silom (recimo, neutrina su isključena iz elektromagnetne interakcije), a još manji broj čestica intereaguje jakom silom. Da bi jedna sila delovala između čestica, svaka čestica pojedinačno mora biti podložna delovanju te sile. Na primer, proton učestvuje u jakoj interakciji, ali proton i elektron nikada ne intereaguje jakom silom. Elektron ne oseća jaku silu i sa protonom može da intereaguje samo delovanjem elektromagnetne ili slabe sile.

12.2.1 Gravitaciona sila

Mada je izuzetno važna u svakodnevnom životu, gravitaciona sila među subatomskim česticama je zanemarljivo mala. Na primer, gravitaciona sila među protonima koji se u jezgru dodiruju je 10^{-38} deo jake sile koja deluje među njima. Glavna razlika između gravitacione i ostalih sila je kumulativno dejstvo i neograničeni domet gravitacije. Jaka i slaba nuklearna sila ne deluju van dimenzija nukleona, 10^{-15}

m. Elektromagnetna sila nema kumulativno dejstvo, zbog zaklanjanja pozitivnog naelektrisanja negativnim, mada je neograničenog dometa poput gravitacione. Pošto takvog zaklanjanja nema, gravitaciona sila raste sa porastom broja čestica i za masivne objekte (nebeska tela) i makroskopska rastojanja postaje preovlađujuća.

12.2.2 Slaba sila

Slaba sila izaziva β-raspad i druge slične raspade subatomskih čestica. Nema značajnu ulogu u izgradnji atomskog jezgra. Slaba sila među protonima koji se dodiruju je 10^{-7} deo jake sile među njima i ima domet kraći od 10^{-18} m. Vrlo brzo opada sa rastojanjem. Kako se vidi iz Tabele 12.2.1 sa porastom rastojanja za manje od dva reda veličine (sa 1×10^{-18} m na 30×10^{-18} m) slaba sila opada za četiri reda veličine (sa 0,8 na 10^{-4}). Mada joj je domet znatno manji od dimenzija nukleona, slaba sila je važna za razumevanje osobina osnovnih čestica i nastanka i razvoja svemira.

Tabela 12.2.1 Osobine osnovnih interakcija

Interakcija	Gravitaciona	Slaba	El. magnetna	Jaka	
		Elektroslaba		Osnovna	Rezidualna
Deluje na:	masu-energiju			boja	
Čestice na koje deluje	sve	sve	naelektrisane	kvarkovi, gluoni	hadroni
Čestice nosioci	gravitoni (još neopaženi)	W^+ W^- Z^0	γ (fotoni)	gluoni	mezoni
Domet	neograničen	10^{-3} fm	neograničen	1 fm	1 fm
Vremena poluraspada	?	$>10^{-10}$ s	$\approx 10^{-16}$ s	$\leq 10^{-20}$ s	
Jačina za dva kvarka na 10^{-18}m		10^{-41}	0,8	1	25	ne važi za kvarkove
Jačina za dva kvarka na 3×10^{-17} m		10^{-41}	10^{-4}	1	60	
Jačina za dva protona u jezgru		10^{-36}	10^{-7}	1	ne važi za hadrone	20

12.2.3 Elektromagnetna sila

Elektromagnetna sila je važna za strukturu i uzajamno delovanje osnovnih čestica. Neke čestice međusobno deluju, ili se raspadaju, isključivo preko elektromagnetnih interakcija. Elektromagnetna sila ima beskonačni domet, ali na makroskopskoj skali zaklanjanje umanjuje njen uticaj. Mnoge uobičajene makroskopske sile (trenje, elastičnost, viskoznost) u krajnjoj liniji su elektromagnetne prirode. Elektromagnetna sila preovlađuje u atomu. U atomskom jezgru, elektromagnetna sila među protonima koji se dodiruju je 100 puta manja od jake sile. Međutim, unutar jezgra elektromagnetna sila deluje kumulativno, jer nema zaklanjanja naelektrisanjem suprotnog znaka. Kao posledica toga elektromagnetna interakcija može da dostigne veličinu jake sile i da u jednakoj meri utiče na stabilnost i strukturu jezgra.

12.2.4 Jaka sila

Jaka sila, koja je ključna za izgradnju atomskog jezgra, ima preovlađujuću ulogu u reakcijama i raspadu najvećeg broja osnovnih čestica. Međutim, neke čestice (na primer, elektroni), uopšte ne osećaju jaku silu. Jaka sila ima vrlo kratak domet, reda 10^{-15} m. Danas je prihvaćeno shvatanje da je nuklearna sila koja deluje između protona i neutrona, zapravo, preostala (rezidualna) jaka sila koja deluje između kvarkova, u potpunoj analogiji sa međumolekulskim silama koje deluju među neutralnim atomima i molekulima, a koje su preostale elektrostatičke interakcije među elektronima i atomskim jezgrima. Za razliku od drugih sila koje opadaju sa rastojanjem, jaka sila raste, Tabela 12.2.1. Porastom jake sile sa rastojanjem među kvarkovima objašnjava se zašto ne može da se opazi slobodan kvark.

12.2.5 Kvanti polja – prenosioci sile

Prema klasičnom stanovištu, sila se sa jedne čestice na drugu prenosi poljem. Na primer, u prostoru oko pozitivnog naelektrisanja stvara se električno polje koje prenosi privlačnu silu na negativno naelektrisanje koje se nalazi u blizini. Štaviše, polje može da prenosi energiju i impuls sa jedne materijalne čestice na drugu. Prema savremenoj teoriji polja, energija i moment polja su kvantovani i kvant koji prenosi jedinični iznos energije ili momenta naziva se čestica polja. Tako se svaka sila može predstaviti emisijom ili apsorpcijom čestice (bozona) koja prenosi interakciju. (Sve čestice polja imaju celobrojni spin, Tabela 12.2.2, dakle, pokoravaju se Boze-Ajnštajnovoj raspodeli, pa se zato nazivaju i bozonima polja.) Na primer, elektromagnetna interakcija među česticama može da se predstavi emisijom i apsorpcijom fotona. Dakle, svakoj sili može da se pridruži odgovarajuće polje koje se prostire preko sopstvenih čestica polja, kao što je naznačeno u Tabeli 12.2.2. Slabi bozoni $W^{\pm}$ i Z^0 učestvuju u procesima β-raspada jezgra. Na primer, β-raspad neutrona (vođen slabom interakcijom) može da se predstavi kao:

$$n \rightarrow p + W^- \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e .$$

Zbog vrlo kratkog života slabi bozon polja W^- se brzo raspada na elektron i antineutrino. Jaku silu među česticama prenose gluoni, elementarne čestice koje se mogu detektovati samo posredno. Graviton, koji je predviđen na osnovu teorije gravitacije, još nije eksperimentalno opažen.

Tabela 12.2.2 Kvanti polja jake, elektromagnetne i slabe interakcije

Kvant polja	Simbol	Spin ($\hbar$)	Masa mirovanja (GeV/c^2)	Srednje vreme života (s)	Tipični raspadi
Gluon	g	1	0		
Foton	γ	1	$<6\times10^{-25}$	Stabilan	
W-bozon	$W^{\pm}$	1	80,22	$3{,}2\times10^{-25}$	e+ν,μ+ν,τ+ν,$q+\bar{q}$ (hadroni)
Z-bozon	Z^0	1	91,187	$2{,}6\times10^{-25}$	e^++e^-,μ^++μ^-,τ^++τ^-,$q+\bar{q}$

12.2.6 Vreme delovanja i domet sila

Relativna jačina sile određuje njen domet i vremensku skalu na kojoj deluje. Bozoni, preko kojih se ostvaruje interakcija, su prividni (virtuelni) jer se, mada emitovani i absorbovani od materijalnih čestica, eksperimentalno ne mogu opaziti. Kako se tokom interakcije bozon emituje i apsorbuje unutar sistema, na dugačkoj vremenskoj skali ne narušava se zakon o održanju energije. Međutim, u intervalu između emisije i apsorpcije bozona zakon o održavanju energije izgleda da biva narušen jer izgleda kao da je bozon nastao ni iz čega. Dakle, postavlja se pitanje: odakle energija za stvaranje virtuelnog bozona u izolovanom sistemu? Ovde se treba prisetiti Hajzenbergove relacije neodređenosti koja u obliku:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \tag{12.2.1}$$

daje vezu između neodređenosti energije, ΔE, i vremena, Δt. (Ovaj oblik je tačniji od već poznate relacije $\Delta E\, \Delta t \geq h$ ali, s obzirom na to da je reč o nejednakosti, razlika nije naročito značajna). Dakle, Hajzenbergova relacija neodređenosti dopušta fluktuacije (odstupanja u okolini srednje vrednosti) energije pri čemu je veličina odstupanja, ΔE, obrnuto proporcionalna dužina intervala, Δt, u kojem je fluktuacija dopuštena. U vezi s emisijom i apsorpcijom virtuelnih bozona, izraz (12.2.1) dopušta nastanak virtuelnog bozona, s tim što mu je vreme života, Δt_{B}, ograničeno sopstvenom energijom, ΔE_B:

$$\Delta t_B \leq \frac{\hbar}{2\Delta E_B}\,. \tag{12.2.2}$$

Dakle, virtuelni bozoni nastaju iz fluktuacija energije. Pošto je energija bozona proporcionalna jačini sile, iz izraza (12.2.2) sledi da je interval u kojem sila deluje obrnuto proporcionalna njenoj jačini. Srednje vreme raspada je često signal za vrstu interakcije koja dovodi do pojave posmatranog procesa. Najbrži raspadi, često na skali od 10^{-23}s, ukazuju na delovanje jake sile. Treba uočiti to da interval od 10^{-23}s odgovara vremenu potrebnom čestici sa nultom masom mirovanja da prevali rastojanje dimenzija bariona (10^{-15}m), tj. vremenu potrebnom da gluon pređe sa jedne čestice na drugu.

Ako je reč o bozonima sa konačnom masom mirovanja, može se uzeti da je energija, ΔE_B potrebna za stvaranje bozona mase m_B data Ajnštajnovom relacijom:

$$\Delta E_B = m_B c^2 \tag{12.2.3}$$

gde je c brzina svetlosti. Zamenom izraza (12.2.3) u (12.2.1) nalazimo vreme života bozona:

$$\Delta t_B \approx \frac{\hbar}{2m_B c^2} \tag{12.2.4}$$

a uzevši da se kreće brzinom bliskom brzini svetlosti, možemo proceniti put koji pređe u toku života, dakle, domet bozona, d_B:

$$d_B = c\Delta t_B \approx \frac{\hbar}{2m_B c}. \tag{12.2.5}$$

Pomoću izraza (12.2.5) Jukava je procenio masu mezona (piona) koji je nosilac preostale jake sile među nukleonima u atomskom jezgru. Znajući da je domet nuklearnih sila reda 10^{-15}m, dakle, d_π= 1 fm, preuređivanjem izraza (12.2.5) nalazimo energiju mirovanja piona:

$$m_\pi c^2 \approx \frac{\hbar c}{2d_\pi} = \frac{0,197\ \text{GeV} \times\ \text{fm}}{2 \times 1\ \text{fm}} \approx 0,1\ \text{GeV} \qquad (12.2.6)$$

koja odgovara masi mirovanja od 100 MeV/c^2. Ova vrednost prilično dobro se slaže s eksperimentalno određenom masom piona (139.6 MeV/c^2, Tabela 12.3.2).

12.3 FAMILIJE ČESTICA

Zbog brojnosti i raznovrsnosti subatomskih čestica korisno je svrstati ih u različite grupe i onda ispitivati sličnosti i razlike među čitavim grupama. Na primer, čestice se mogu grupisati na osnovu sila, čijem su uticaju podložne kako je već pokazano u Tabeli 12.2.1. Drugi, još očigledniji, način za grupisanje čestica je na osnovu masa. Vrlo rano je uočeno da tri grupe čestica, lakše čestice (elektroni, mioni, neutrina, ...), teže (protoni, neutroni, ...) i srednje (pioni, kaoni, ...) imaju posebne osobine. Prvobitni nazivi tih grupa izvedeni su iz grčkih prideva lak (leptoni), srednji (mezoni) i težak (barioni), Tabela 12.1.1. Mada je podela prema masama zastarela (u međuvremenu je pronađen lepton sa masom većom od mase protona ili neutrona) nazivi su zadržani da označe familije čestica sa sličnim, više ne masama, već drugim važnim osobinama. U svetlu prethodne klasifikacije (prema osnovnim silama) leptoni se razlikuju od mezona i bariona po tome što na njih ne deluje jaka sila.

Tabela 12.1.1 pokazuje zbirno grupisanje čestica po familijama.

12.3.1 Leptoni

Leptoni intereaguju samo posredstvom slabe i elektromagnetne sile. Nijedan do sada izveden eksperiment ne ukazuje na postojanje unutrašnje strukture leptona. Dakle, leptoni su zaista elementarne čestice koje se ne mogu rastaviti na još prostije sastojke. Nepostojanje unutrašnje strukture leptona u saglasnosti je sa sadašnjim teorijama koje leptone i kvarkove smatraju bezdimenzionim tačkastim česticama. Svi poznati leptoni imaju spin 1/2.

Tabela 12.3.1 Familija leptona

Naziv	Čestica	Antičestica	Nelektrisanje (e)	Spin (ħ)	Masa mirovanja (MeV/c^2)	Srednje vreme života	Tipični proizvodi raspada
Elektron	e^-	e^+	-1	1/2	0,511	∞	–
Elektronski neutrino	ν_e	$\tilde{\nu}e$	0	1/2	<10eV	∞	–
Mion	μ^-	μ^+	–1	1/2	105,7	$2,2\times10^{-6}$	$e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$
Mionski neutrino	ν_μ	$\bar{\nu}_\mu$	0	1/2	<0,3	∞	_
Tau	τ^-	τ^+	-1	1/2	1777	$3,0\times10^{-13}$	$\mu^- + \bar{\nu}_\mu + \nu_\tau$
Tau neutrino	ν_τ	$\bar{\nu}_t$	0	1/2	<40	∞	_

Tabela 12.3.1 pokazuje: šest poznatih leptona grupisanih u tri para čestica. Svaki par uključuje naelektrisanu česticu i odgovarajući neutrino (neutralnu česticu). Svaki lepton ima odgovarajuću antičesticu.

12.3.2 Mezoni

Mezoni su vrlo reaktivne (nestabilne) čestice sa celobrojnim spinom, Tabela 12.3.2. Mogu da nastanu i u reakcijama pod uticajem jake sile. Raspadaju se na druge mezone ili leptone pomoću jakih, elektromagnetnih ili slabih interakcija.

Tabela 12.3.2 Neki dugoživeći predstavnici familije mezona

Naziv	Čestica	Anti-čestica	Naelektri-sanje[a] (e)	Spin ($\hbar$)	Stranost*	Masa mirovanja (MeV/c^2)	Srednji život (s)	Tipični proizvodi raspada
Pion	π^+	π^-	+1	0	0	139,57	$2{,}6\times10^{-8}$	$\mu^+ + \nu_\mu$
	π^0	π^0	0	0	0	134,98	$8{,}4\times10^{-17}$	$\gamma+\gamma$
Kaon	K^+	K^-	+1	0	+1	493,7	$1{,}24\times10^{-8}$	$\mu^+ + \nu_\mu$
	K^0	$\overline{K}^0$	0	0	+1	497,7	$0{,}9\times10^{-10}$	$\pi^+ + \pi^-$
Eta	η	η	0	0	0	547,5	$8{,}0\times10^{-19}$	$\gamma+\gamma$
Ro	ρ^+	ρ^-	+1	1	0	769	$4{,}5\times10^{-24}$	$\pi^+ + \pi^0$
	η'	η'	0	0	0	958	$2{,}2\times10^{-21}$	$\eta+\pi^+ + \pi^-$
De	D^+	D^-	+1	0	0	1869	$1{,}1\times10^{-12}$	$K^- + \pi^+ + \pi^+$
Psi	ψ	ψ	0	1	0	3097	$1{,}0\times10^{-20}$	$e^+ + e^-$
Be	B^+	B^-	+1	0	0	5278	$1{,}5\times10^{-12}$	$D^- + \pi^+ + \pi^+$
Ipsilon	Y	Y	0	1	0	9460	$1{,}3\times10^{-20}$	$e^+ + e^-$

* Naelektrisanje i stranost odnose se na čestice. Vrednosti za antičestice imaju suprotan znak. Spin, masa mirovanja i srednje vreme života imaju iste vrednosti za česticu i njoj odgovarajuću antičesticu.

Pošto nisu opaženi u običnoj materiji, podela mezona na čestice i antičestice je prilično proizvoljna. Tako se za naelektrisane mezone uzima da je pozitivni mezon čestica, a negativni antičestica. Na primer, π^+ mezon se smatra česticom, a π^- njegovom antičesticom. Kod nekih neutralnih mezona, recimo η i π^0, čestica i antičestica su identične, dok se kod drugih, recimo K^0 i $\overline{K}^0$, čestica i antičestica međusobno razlikuju. Pošto su masa i stabilnost čestice i odgovarajuće antičestice jednaki, postojanje parova čestica-antičestica za čestice bez naelektrisanja jasno ukazuje na to da postoje i druge osobine, osim naelektrisanja, na osnovu kojih čestica i antičestica mogu da se razlikuju.

12.3.3 Barioni

Barioni su čestice sa polucelim spinskim kvantnim brojem koje učestvuju u jakim interakcijama, Tabela 12.3.3. Poput leptona, antičestice bariona različite su od odgovarajućih čestica. Slično mezonima, barioni mogu nastati u jakim interakcijama nukleona, a raspadaju se preko jake, elektromagnetne ili slabe interakcije.

Tabela 12.3.3 Neki članovi familije bariona

Naziv	Čestica	Anti-čestica	Naelektrisanje* (e)	Spin ($\hbar$)	Stranost*	Masa mirovanja (MeV/c^2)	Srednji život (s)	Tipični proizvodi raspada
Proton	p	$\bar{p}$	+1	1/2	0	938,27	∞	
Neutron	n	$\bar{n}$	0	1/2	0	939,57	889	$p+e^-+\bar{\nu}_e$
Lambda	Λ^0	$\bar{\Lambda}^0$	0	1/2	-1	1115,7	$2{,}6\times10^{-10}$	$p+\pi^-$
Sigma	Σ^+	$\bar{\Sigma}^+$	+1	1/2	-1	1189,4	$0{,}8\times10^{-10}$	$p+\pi^0$
	Σ^0	$\bar{\Sigma}^0$	0	1/2	-1	1192,6	$7{,}4\times10^{-20}$	$\Lambda^0+\gamma$
	Σ^-	$\bar{\Sigma}^-$	-1	1/2	-1	1197,4	$1{,}5\times10^{-10}$	$n+\pi^-$
Ksi	Ξ^0	$\bar{\Xi}^0$	0	1/2	-2	1314,9	$2{,}9\times10^{-10}$	$\Lambda^0+\pi^0$
	Ξ^-	$\bar{\Xi}^-$	-1	1/2	-2	1321,3	$1{,}6\times10^{-10}$	$\Lambda^0+\pi^-$
Delta	Δ^*	$\bar{\Delta}^*$	+2,+1,0,-1	3/2	0	1232	6×10^{-24}	$p+\pi$
	Σ^*	$\bar{\Sigma}^*$	+1,0,-1	3/2	-1	1385	2×10^{-23}	$\Lambda^0+\pi$
	Ξ^*	$\bar{\Xi}^*$	-1,0	3/2	-2	1530	6×10^{-23}	$\Xi+\pi$
Omega	Ω^-	$\bar{\Omega}^-$	-1	3/2	-3	1672,5	$8{,}2\times10^{-11}$	Λ^0+K^-

* Naelektrisanje i stranost odnose se na čestice. Vrednosti za antičestice imaju suprotan znak. Spin, masa mirovanja i srednje vreme života imaju iste vrednosti za česticu i njoj odgovarajuću antičesticu.

12.4 ČESTICE I ANTIČESTICE

Svaka čestica ima odgovarajuću antičesticu. Neke osobine antičestice identične su s osobinama pripadajuće joj čestice (recimo, masa ili srednje vreme života) a neke osobine su istog intenziteta ali suprotnog znaka, recimo, nelektrisanje. Antičestica elektrona, e^-, je pozitron, e^+, koji je otkriven u interakciji kosmičkih zraka sa materijom. Pozitron ima naelektrisanje $+e$ (suprotno naelektrisanju elektrona, $-e$) i masu mirovanja 0,511 MeV/c^2, identičnu sa masom elektrona. Antiproton, $\bar{p}$, pronađen 1956, ima naelektrisanje $-e$ i masu mirovana 938 MeV/c^2.

Antičestice stabilnih čestica (kao pozitron ili antiproton) takođe su stabilne. Međutim, kada se čestica i njena antičestica sudare dolazi do anihilacije obe: čestica i antičestica iščezavaju, stvarajući dva ili više fotona. Pri tome su energija i impuls prvobitnih čestica očuvani i preneti na fotone. Na primer, u anihilaciji elektrona i pozitrona nastaju dva fotona čija je energija (zanemarujući kinetičku energiju čestice) jednaka energiji mase mirovanja prvobitnih čestica:

$$e^- + e^+ \rightarrow \gamma_1 + \gamma_2 \qquad (E_{\gamma 1} = E_{\gamma 2} = 0,511 \text{ MeV}).$$

Slično tome, pri anihilaciji protona, p, i antiprotona, $\bar{p}$, nastaju dva fotona s energijom koja je jednaka energiji mase mirovanja protona:

$$p + \bar{p} \rightarrow \gamma_1 + \gamma_2 \qquad (E_{\gamma 1} = E_{\gamma 2} = 938 \text{ MeV}).$$

Ako pođemo od toga da ono što nas okružuje smatramo materijom onda, obično nije teško napraviti razliku između čestica i antičestica. Dakle, pod česticama podrazumevamo osnovne činioce materije – elektrone, protone i neutrone. Pošto neutrina ne ulazi u sastav materije nemamo osnovu da razlikujemo neutrina od antineutrina. Ipak, zakone održanja u β-raspadu lakše je razumeti ako se uzme da je antineutrino čestica koja nastaje prilikom β^- raspada, a neutrino prilikom β^+ raspada i K-zahvata. Slično tome, za druge čestice/antičestice pripadnost se određuje na osnovu proizvoda raspada. Na primer, krajnji proizvodi raspada teškog bariona lambda, Λ, su protoni i neutroni. Dakle, Λ je čestica jer se raspada na neutron, a antilambda, $\overline{\Lambda}$, je antičestica čiji je konačan proizvod raspada antineutron, $\overline{n}$. Slično tome, leptoni μ^+ i μ^- stvaraju par čestica/antičestica. Kako se μ^- raspada na elektron, e^-, a ima i niz osobina sličnih elektronu, on je čestica a μ^+ je antičestica. Slučaj sa pionima je nešto teži. Pioni mogu biti neutralni ili naelektrisani: π^0, π^+, π^-. Neutralni pion, poput fotona, sam je sebi antičestica dok su pioni π^+ i π^- antičestice jedan drugome. Dakle, postavlja se pitanje koji je od dva naelektrisana piona čestica. Pioni ne ulaze u sastav obične materije pa se na osnovu toga ne može izvesti zaključak. Isto, zaključak se ne može izvući iz raspada jer iz svakog piona nastaje lepton i antilepton. Izgleda da nema načina, a možda ni potrebe, da se za π mezone pravi razlika između čestice i antičestice pa česticama π^+, π^0, π^- odgovaraju antičestice π^-, π^0, π^+, respektivno.

Kao što kombinacijom čestica nastaje materija tako i kombinacijom odgovarajućih antičestica nastaje antimaterija. Na primer, stabilan atom antivodonika može da nastane vezivanjem pozitrona za antiproton. Njegove osobine bi trebalo da budu identične s osobinama običnog vodonika. Zaista, 1995. godine atom antivodonika je proizveden u sudarima antiprotona sa mlazom atoma ksenona. U sudaru antiprotona sa atomskim jezgrom ksenona ponekad dođe do stvaranja para elektron-pozitron. Pri tom može da se dogodi (mada vrlo retko) da brzina i pravac kretanja novonastalog pozitrona budu bliski brzini i putanji antiprotona. Tada pod uticajem privlačne sile između pozitrona (pozitivne čestice) i antiprotona (negativne čestice) nastaje atom antivodonika. Izolovan atom antivodonika stabilan je koliko i izolovan atom vodonika. Međutim, u sudaru s običnom materijom dolazi do njegove anihilacije. Pošto se čestice kreću brzinom bliskom brzini svetlosti, vreme života antivodonika u aparaturi reda je veličine 4×10^{-8} s koliko antiatomu treba da prevali desetak metara i anihilira se u sudaru sa zidom aparature. Ulažu se veliki napori da se proizvedeni atomi antivodonika zarobe u električnom i magnetnom polju, dakle, da se izoluju od obične materije i tako im se produži život u meri koja će dozvoliti detaljnije ispitivanje atomskih osobina. Proizvodnjom prvih atoma antivodonika odškrinuta su vrata sistematskom ispitivanju antisveta.

12.5 ZAKONI ODRŽANJA

Zakoni održanja predstavljaju jedan od osnovnih principa savremene slike o strukturi materije. Do sada smo u više navrata koristili zakone o održanju energije, održanju impulsa i održanju naelektrisanja. Zakon o održanju masa jedan je od osnovnih zakona hemije. Slično tome, i zakon o održanju naelektrisanja je, jedan od osnovnih zakona fizike. Zapravo, kada se detaljnije pogleda, zbog veze između naelektrisanja i mase čestica koje izgrađuju materiju, ta dva zakona imaju isto poreklo.

Na primer, u hemijskoj reakciji nastajanja vode iz vodonika i kiseonika mase ovih elemenata sa leve i sa desne strane jednačine moraju da budu jednake:

$$2H_2 + O_2 = 2H_2O$$

što je isto kao da smo rekli da broj elektrona sa leve strane mora biti jednak broju elektrona sa desne strane jednačine. (U hemijskim reakcijama elektroni se samo pregrupišu, te je jasno da njihov broj ostaje stalan.)

Slično hemijskim reakcijama, u nuklearnim reakcijama broj neutrona i broj protona moraju da budu očuvani. Na primer, u reakciji α-raspada:

$$^{235}_{92}U_{143} \rightarrow {}^{231}_{90}Th_{141} + {}^{4}_{2}He_{2}$$

ili izbijanja neutrona protonom:

$$p + {}^{63}_{29}Cu_{34} \rightarrow {}^{63}_{30}Zn_{33} + n$$

izjednačavamo posebno broj protona i posebno broj neutrona s leve i s desne strane izraza, što može da navede na pomisao da broj protona i broj neutrona u nuklearnim reakcijama mora biti očuvan. Međutim, već najjednostavniji primer β^--raspada neutrona:

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$$

ukazuje na suprotno: ni broj protona ni broj neutrona nisu očuvani. Ipak, očuvan je njihov zbir. Dakle, u nuklearnim reakcijama održava se broj nukleona, a održanje broja protona i broja neutrona predstavlja samo specijalan slučaj.

12.5.1 Održanje leptonskog broja

Kao što je zakon o održanju mase uveo red u hemiju, tako su i zakoni održanja doprineli razumevanju raspada i reakcija subatomskih čestica. Na primer, u β^--raspadu oslobađa se antineutrino, ali nikada i neutrino. Slično tome, u β^+-raspadu kao proizvod uvek se javlja neutrino, ali nikada antineutrino. Tu pravilnost najlakše je uzeti u obzir ako se svakoj čestici pripiše odgovarajući **leptonski broj**, *L*. Leptonima česticama (elektronu i neutronu) pripisujemo vrednost +1, a leptonima antičesticama (pozitronu i antineutrinu) vrednost -1. Svi mezoni i barioni, dakle čestice koje nisu leptoni, imaju leptonski broj jednak nuli. Tada se zakon o održanju leptonskog broja za β^- i β^+ raspad može izraziti na sledeći način:

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$$

$$L\text{: } 0 = 0 + 1 + (-1)$$

i:

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$$

$$L\text{: } 0 = 0 + (-1) + 1.$$

Vidimo to da ukupni leptonski broj ostaje nula na obe strane izraza, čime je uzeta u obzir činjenica da se antineutrino isključivo javlja pri β^-, a neutrino isključivo pri β^+ -raspadu.

Saglasno zakonu o održavanju leptonskog broja, sledeći procesi nisu dozovljeni:

$$e^- + p \not\rightarrow n + \bar{\nu}_e$$

$$L: \quad 1 + 0 \neq 0 + (-1)$$

i:

$$p \not\rightarrow e^+ + \gamma$$

$$\text{L:} \quad 0 \neq (-1) + 0$$

Kao kod hemijskih reakcija gde se održanje mase za svaki element traži posebno, tako se i u uravnotežavanju leptonskih brojeva za svaku vrstu leptona (e, μ, τ) posebno, uravnotežava leptonski broj. Dokazi za to dobijeni su iz brojnih eksperimenata. Na primer, nikada nije opažen raspad:

$$\mu^- \rightarrow e^- + \gamma$$

dok je reakcija:

$$\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$$

uobičajena. Prva reakcija je zabranjena, mada je „ukupni" leptonski broj očuvan, zato što leptonski brojevi elektrona i miona svaki za sebe nisu uravnoteženi. Druga reakcija je dozvoljena, jer je ostvarena detaljna ravnoteža leptonskih brojeva, posebno za elektrone i posebno za mione. Ako se za svaku vrstu leptona uvedu posebni leptonski brojevi, L_e, L_μ L_τ, zakon o održanju leptonskog broja može se formulisati na sledeći način: **U svakom procesu, leptonski broj svake vrste leptona, posebno elektronskih, posebno mionskih i posebno tau leptona, ostaje stalan**. Na osnovu zakona o održanju leptonskog broja postaje jasno zašto se u reakcijama nekada javlja neutrino, a nekada antineutrino.

12.5.2 Održanje barionskog broja

Sličan zakon održanja može se izvesti i za **barionski broj.** Svim barionima pripisuje se barionski broj $B = +1$, a antibarionima $B = -1$. Za „nebarione" (mezone i leptone) $B = 0$. Tada se formuliše zakon o održavanju barionskog broja. **U svakom procesu, ukupni barionski broj ostaje stalan**. Održanje broja nukleona specijalni je slučaj zakona o održanju barionskog broja. Eksperimentalno nije opažen nijedan proces koji nije u saglasnosti sa održanjem barionskog broja. Primer za proces koji je u saglasnosti sa zakonom o održanju barionskog broja je reakcija u kojoj je prvi put opažen antiproton:

$$p + p \rightarrow p + p + p + \bar{p}\,.$$

Međutim, slična reakcija u kojoj bi mogao da nastane antineutron:

$$p + p \not\rightarrow (p + p + \bar{n})$$

nije eksperimentalno opažena, jer je zabranjena po zakonu o održanju barionskog broja.

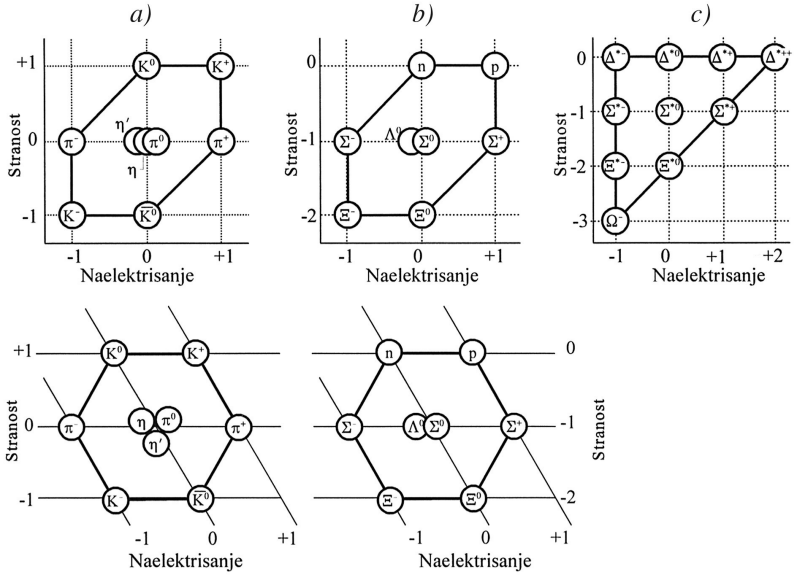
12.5.3 Održanje stranosti

U analizi reakcija koje uključuju mezone, nije zapažena nikakava pravilnost u vezi s održanjem njihovog broja, dakle, ukupni broj mezona ne mora biti očuvan. Međutim, analizom vremena života mezona i proizvoda njihovog raspada, uočeno je da za različite mezone postoje različita pravila, dakle, da postoji nova osobina (kvantni broj) po kojoj bi se mezoni mogli razlikovati. Zbog neobičnosti, nova osobina je nazvana **stranost** i odlikuje se odgovarajućim kvantnim brojem, S. Ova osobina, kao i mnoge druge osobine subatomskih čestica, nema ekvivalenta u makrosvetu. Na primer, K^0 i K^+ mezonima pripisuje se jedinična stranost, $S = 1$, a „nestranim" česticama, poput π mezona i leptona, $S = 0$. Mnogi barioni imaju stranost različitu od nule, kako je pokazano u Tabeli 12.3.3. Stranost antičestice je suprotnog znaka od stranosti odgovarajuće čestice. Zakon održanja može se formulisati i za stranost: **U procesima vođenim jakom ili elektromagnetnom interakcijom, ukupna stranost ostaje očuvana. U procesima vođenim slabom interakcijom, stranost ostaje nepromenjena ili se menja za jedinicu.**

Leptonski broj, barionski broj i stranost korisni su koncepti pomoću kojih mogu da se objasne reakcije (ili njihovo odsustvo) kod subatomskih čestica. Međutim, još uvek je nejasno zašto se leptonski ili barionski brojevi održavaju i šta predstavlja stranost.

12.6 MODEL KVARKA

Mada klase i osobine subatomskih čestica izgledaju prilično komplikovano, uočene brojne pravilnosti ukazuju na to da se ceo sistem može, ipak, opisati relativno jednostavnom šemom koja još uvek nije očigledna. Na primer, ako se čestice sortiraju prema stranosti i naelektrisanju, kako je pokazano na Slici 12.6.1, mogu se uočiti jasni geometrijski odnosi. Analizirajući odnose među osobinama poznatih subatomskih čestica, Gel-Man (Murray Gell-Mann) i Cvjag (George Zweig) su, nezavisno i istovremeno, 1964. godine uočili jednostavan sistem iz kojeg neposredno proističe uređenost. Oni su pokazali da poznate pravilnosti među hadronima (mezonima i barionima) mogu da se objasne samo na osnovu pretpostavke da su ovi izgrađeni od tri elementarne čestice, koje su ubrzo postale poznate pod nazivom **kvarkovi**. Da bi slika bila ispravna, ta tri kvarka, u-kvark (u od engl. up - gore), d-kvark (d od engl. down -dole) i s-kvark (s od engl. strange – stran) treba da imaju osobine prikazane u Tabeli 12.6.1. (Kasnije se pokazalo da je za opis svih poznatih hadrona potrebno ukupno šest kvarkova.)



Slika 12.6.1 Uređenje mezona i bariona prema poznatim osobinama: a) mezoni; b) barioni sa spinom 1/2; c) barioni sa spinom 3/2. Da bi veze među različitim česticama bile uočljivije, dijagrami se najčešće predstavljaju u iskošenom koordinatnom sistemu, slike a) i b) dole.

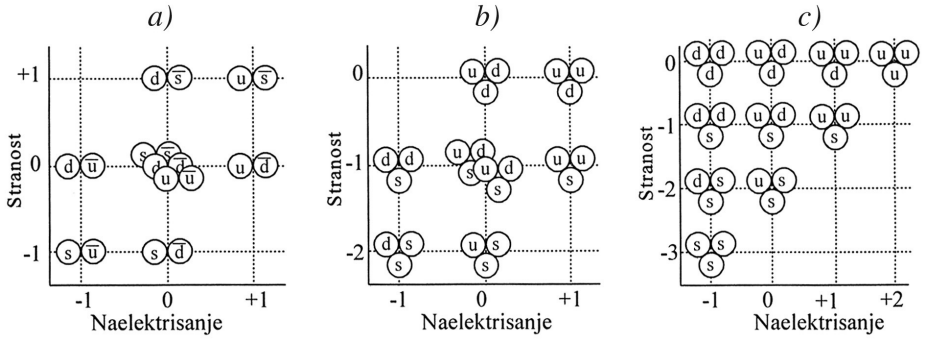
Tabela 12.6.1 Osobine prva tri kvarka

Naziv	Simbol	Naelektrisanje (e)	Spin ($\hbar$)	Barionski broj	Stranost	Antikvark
u-kvark	u	+2/3	1/2	+1/3	0	$\bar{u}$
d-kvark	d	–1/3	1/2	+1/3	0	$\bar{d}$
s-kvark	s	–1/3	1/2	+1/3	–1	$\bar{s}$

12.6.1 Mezoni

Pošto mezoni imaju spin 0, a kvarkovi 1/2, najjednostavnije je zamisliti da je mezon sastavljen od dva kvarka sa antiparalelnim spinovima. Problem je što je barionski broj mezona jednak nuli, $B = 0$, dok je za dva kvarka barionski broj 2/3, $B = 1/3 + 1/3 = 2/3$. Međutim, barionski broj može da se učini nulom ako se kombinuje kvark, $B = 1/3$, sa antikvarkom, $B = -1/3$. Na primer, kombinovanjem u-kvarka sa $\bar{d}$-kvarkom ($\bar{d}$-kvark je anti d-kvark) dobija se kombinacija $u\bar{d}$, sa nultim barionskim brojem, nultim spinom i naelektrisanjem $+2/3e + 1/3e = +e$. (Naelektrisanje d-kvarka je $-1/3\ e$, pa je otuda i $\bar{d}$-kvarka isto samo sa promenjenim znakom, dakle, $+1/3e$). Osobine ove kombinacije kvarkova identične su sa osobinama π^+ mezona, dakle π^+ mezon je kombinacija $u\bar{d}$. Na sličan način može se naći devet kombinacija kvark-antikvark, od kojih svaka odgovara po jednom poznatom mezonu. Na-

nošenjem, na isti način kao na Slici 12.6.1, stranosti u funkciji naelektrisanja za sve kombinacije, Slika 12.6.2a, dobijamo dijagram iz kojeg se uočava jednoznačna veza između mezona i kombinacija kvark-antikvark.



Slika 12.6.2 Uređenja kombinacija kvarkova prema poznatim osobinama: a) parovi kvark-antikvark (mezoni); b) trojke kvarkova sa spinom 1/2; c) trojke kvarkova sa spinom 3/2. Iz jednoznačne veze između ovih rasporeda i rasporeda za mezone i barione sa Slike 12.6.1 uočljiva je kvarkovska struktura hadrona.

Dakle, mezoni predstavljalju kombinacije kvarkova i antikvarkova.

Tabela 12.6.2 Moguće kombinacije kvark-antikvark za u, d i s-kvarkove

Kombinacija	Naelektrisanje (e)	Spin ($\hbar$)	Barionski broj	Stranost
$u\bar{u}$	0	0,1	0	0
$u\bar{d}$	+1	0,1	0	0
$u\bar{s}$	+1	0,1	0	+1
$d\bar{u}$	–1	0,1	0	0
$d\bar{d}$	0	0,1	0	0
$d\bar{s}$	0	0,1	0	+1
$s\bar{u}$	–1	0,1	0	–1
$s\bar{d}$	0	0,1	0	–1
$s\bar{s}$	00	0,1	0	0

12.6.2 Barioni

Barioni imaju jedinični barionski broj, B=+1, i spin 1/2 ili 3/2, što neposredno ukazuje na to da tri kvarka čine jedan barion. Deset mogućih kombinacija tri osnovna kvarka prikazano je u Tabeli 12.6.2. Njihov raspored prema stranosti i naelektrisanju, prikazan na Slici 12.6.1 b), c), identičan je onome za kvarkovske trojke sa spinom 1/2 i 3/2, prikazanim na Slici 12.6.2 b), c).

Tabela 12.6.3 Moguće trokvarkovske kombinacije u-, d- i s-kvarkova

Kombinacija	Naelektrisanje (e)	Spin ($\hbar$)	Barionski broj	Stranost
uuu	+2	3/2	+1	0
uud	+1	1/2, 3/2	+1	0
udd	0	1/2, 3/2	+1	0
uus	+1	1/2, 3/2	+1	–1
uss	0	1/2, 3/2	+1	–2
uds	0	1/2, 3/2	+1	–1
ddd	–1	3/2	+1	0
dds	–1	1/2, 3/2	+1	–1
dss	–1	1/2, 3/2	+1	–2
sss	–1	3/2	+1	–3

Dakle, barioni su čestice sastavljene od tri kvarka.

12.6.3 Osnovna pravila za reakcije kvarkova

Za analizu raspada i reakcija subatomskih čestica pomoću modela kvarka, dovoljno je znati dva pravila:

1. Par kvark-antikvark može da nastane iz kvanta energije i isto tako da se u njega pretvori. Na primer:

$$d + \bar{d} \rightarrow \text{energija ili energija} \rightarrow u + \bar{u}\,.$$

Ta energija može biti u obliku gama zraka ili može da se razmeni sa drugim česticama u procesu raspada ili u reakciji;

2. Slaba interakcija može da preobrazi kvark iz jedne vrste u drugu kroz emisiju ili apsorpciju bozona W^+ ili W^-. Na primer:

$$s \rightarrow u + W^-\,.$$

Bozon polja *W* dalje se raspada pomoću slabe interakcije, na primer:

$$W^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu\,.$$

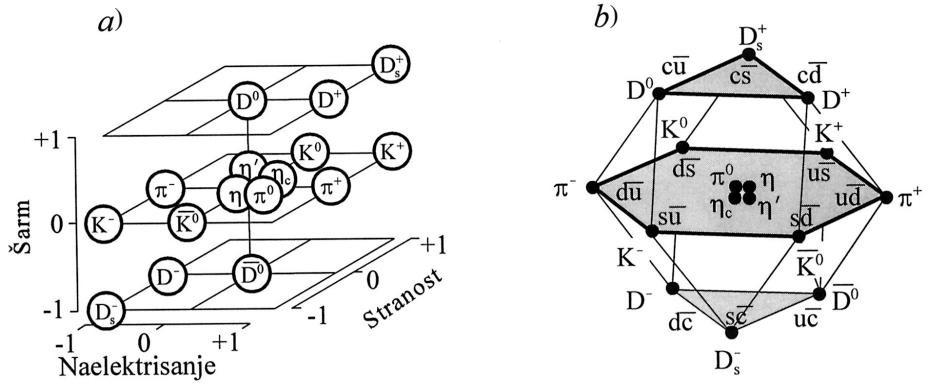
Jaka i elektromagnetna interakcija ne mogu da preobraze jedan kvark u drugi.

12.6.4 Novi kvarkovi: c, b, t

c-kvark. Godine 1974. otkriven je novi mezon ψ sa masom mirovanja od 3,1 GeV/c^2 i vremenom života reda 10^{-20} s. Proizvodi njegovog raspada su e^+ i e^-. Po analogiji sa drugim poznatim mezonima očekivan je njegov raspad preko lakših mezona, u jakoj interakciji, sa vremenom života reda 10^{-23} s. Međutim, tri reda veličine, duže vreme života, kao i pojava elektrona i pozitrona tokom raspada, ukazivali su jasno na to da se raspad ne odvija preko jake interakcije. Pošto su svim kombinaci-

jama poznatih kvarkova već bili pridruženi poznati mezoni, jedino objašnjenje za neobične osobine Ψ mezona jeste da je on kombinacija koja uključuje još neki nepoznati kvark. Zaista, pokazalo se da se osobine ψ mezona mogu najlakše objasniti ako se uzme da je on sastavljen od novog c-kvarka i njegovog antikvarka, $\bar{c}$. Postojanje c-kvarka predviđeno je četiri godine ranije, da bi se objasnilo zašto u raspadu K^0 mezona nema reakcije $K^0 \rightarrow \mu^+ + \mu^-$, koja ne protivreči ni jednom poznatom pravilu.

Novi kvark c (c od engl. charm – šarm) ima naelektrisanje $+2/3e$ i novu osobinu, **šarm**, koja je nova i posebna, poput stranosti. Novoj osobini pripisuje se novi kvantni broj, C. Za c-kvark C=+1, a za $\bar{c}$-kvark (antikvark) $C = -1$; svi ostali kvarkovi imaju $C = 0$. Sada možemo napraviti novu šemu mezona od 16 $q\bar{q}$ parova (kombinacija četiri kvarka sa četiri antikvarka), s tim da sa dodatkom nove osobine, šarma, dijagram postaje trodimenzioni, kao što je ilustrovano na Slici 12.6.3. Svi novi mezoni na slici, D-mezoni, eksperimentalno su opaženi u sudarima čestica visoke energije.

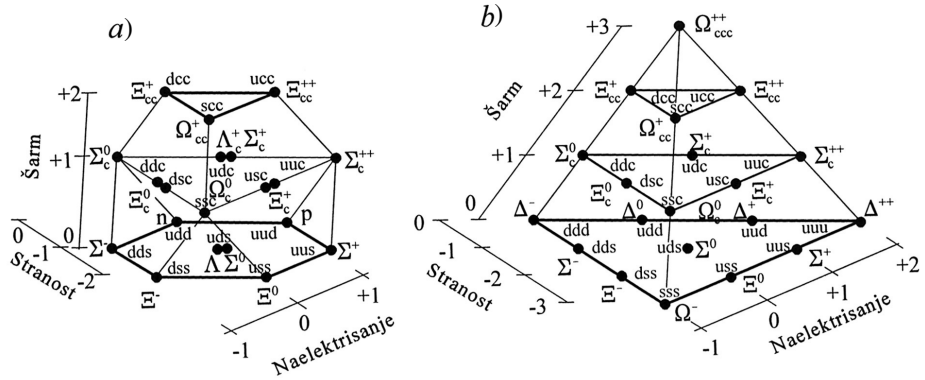


Slika 12.6.3 Veza među mezonima u čiji sastav ulaze i c-kvark i njegov antikvark ($\bar{c}$). Dodatkom nove osobine (šarma) šema postaje trodimenziona: a) šema mezona u ortogonalnim koordinatama; b) ista šema u iskošenim koordinatama. Mezoni u centru srednje ravni (S = 0) predstavljaju mešana stanja parova $u\bar{u}$, $d\bar{d}$, $s\bar{s}$ i $c\bar{c}$. U šemi b) trouglovima su povezani mezoni koji imaju jedan zajednički kvark.

b-kvark. Sličan tok događaja ponovio se 1977. godine sa Υ (ipsilon) mezonom.

Utvrđeno je da je njegova energija mirovanja 9,5 GeV/c^2 i da se relativno sporo raspada (vreme života reda 10^{-20} s), preko elektrona i pozitrona, umesto preko lakših mezona. Opet je predložen novi kvark, b-kvark (b od engl. bottom – dno; ili od engl. beauty – lep) sa novim kvantnim brojem $B = -1$ i naelektrisanjem $-1/3$ e. Nova osobina koja se opisuje kvantnim brojem B nekad se naziva lepota (engl. beauty).

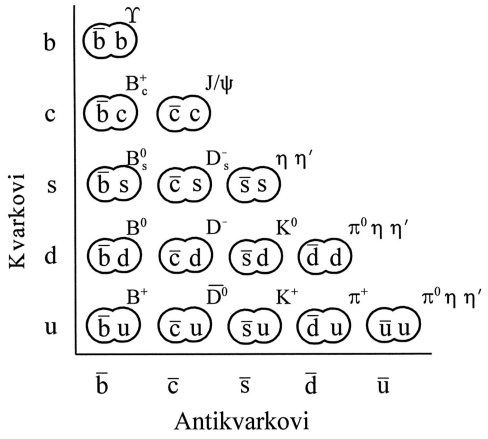
t-kvark. Šesti, po današnjem shvatanju, poslednji kvark otkriven je 1994. u sudarima protona sa antiprotonima u Fermijevoj nacionalnoj laboratoriji (Fermilab) u SAD. U sudarima nastaju kvark i njegov antikvark, koji se brzo raspadaju u pljusak sekundarnih čestica. Merenjem energije i momenta sekundarnih čestica, masa mirovanja kvarka procenjena je na 180 GeV/c^2, što približno odgovara masi atoma zlata.



Slika 12.6.4 Šeme bariona: a) sa spinom 1/2; b) sa spinom 3/2. Iste kombinacije kvarkova sa različitim spinom mogu se smatrati jednom te istom česticom u dva pobuđena stanja. Na primer, proton (stabilni barion) sastoji se od iste kombinacije kvarkova (uud) kao Δ^+ čestica koja je vrlo nestabilna.

Novi kvark dobio je ime t-kvark (od engl. top –vrh) i njemu se pridružuje jedinstvena nova osobina, vrhnost (engl. topness) sa kvantnim brojem $T = +1$.

I novi kvarkovi ulaze u sastav mezona i bariona, Slika 12.6.4. Slika 12.6.5 pokazuje 16 mogućih parova kvark-antikvark za u, d, s, c, i b-kvarkove. Postojanje svih ovih kombinacija je eksperimentalno potvrđeno. Poslednji mezon, B_c (kombinacija $\bar{b}c$), otkriven je 1998. godine. Mezoni sa t-kvarkom nisu opaženi zbog njegove ogromne mase i nestabilnosti; t-kvark se raspada pre nego što uspe da se spari sa drugim kvarkom i formira mezon.

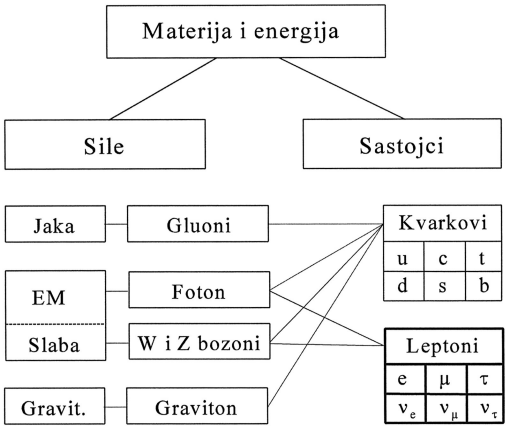


Slika 12.6.5. Do danas otkriveni mezoni su kombinacije u, d, s, c i b-kvarkova; t-kvarkovi su previše masivni i nestabilni da bi obrazovali mezone. Prikazan je samo po jedan predstavnik para mezon-antimezon.

12.7 Standardni model

Standardni model predstavlja savremenu teoriju strukture elementarnih čestica prema kojoj se svi poznati eksperimenti i pojave mogu objasniti na osnovu interakcije 6 leptona, 6 kvarkova (i njihovih antičestica: antileptona i antikvarkova) i

čestica polja (fotona, 3 bozona slabog polja i 8 gluona) koje prenose silu, Slika 12.7.1.



Slika 12.7.1 Standardni model uspostavlja vezu među elementarnim materijalnim česticama (leptonima i kvarkovima) i česticama polja.

Materija koja nas okružuje sastoji se od protona i neutrona, koji se dalje sastoje od u-kvarkova i d-kvarkova; u sastav materije takođe ulaze elektroni. U radioaktivnom raspadu emituje se elektronski neutrino. Dakle, možemo smatrati da se naš celokupni svet sastoji od četiri čestice sa spinom 1/2 (i njihovih antičestica) koje se mogu grupisati u par leptona i par kvarkova, Slika 12.7.1:

$$(e, \nu_e) \text{ i } (u, d)$$

koja se nekad nazivaju prva generacija čestica. Naelektrisanje čestica unutar svakog para razlikuje se za jedinicu: –1 i 0 za leptone i +2/3 i –1/3 za kvarkove.

U eksperimentima sa akceleratorima čestica pronađene su nove čestice mion i mionski neutrino, kao i mezoni i barioni sa novim osobinama–stranošću i šarmom. Struktura tih čestica može se opisati novim parom leptona i kvarkova, Slika 12.7.1:

$$(\mu , \nu_\mu) \text{ i } (c, s)$$

koji čine drugu generaciju čestica. Unutar parova, opet, postoji jedinična razlika u naelektrisanju.

Pri još većim energijama, javljaju se čestice koje se sastoje od novog para leptona (tau i tau neutrino) i novog para kvarkova, t-kvarka i b-kvarka, što predstavlja novu generaciju parova leptona i kvarkova, Slika 12.7.1:

$$(\tau, \nu_\tau), \text{ i } (t, b)$$

poznatu kao treća generacija. Osobine šest kvarkova i njihovih antikvarkova pokazane su u Tabeli 12.7.1. Mase kvarkova ne mogu da se odrede neposredno, jer slobodni kvarkovi nisu opaženi. Pokazane mase mirovanja procenjene su na osnovu prividnih masa kvarkova kada su vezani u različitim česticama. Na primer, izmerena masa protona predstavlja zbir masa kvarkova (od kojih je proton izgrađen)

umanjenu za energiju vezivanja kvarkova. Pošto vezivna energija nije poznata, ne može se znati ni energija mirovanja kvarka.

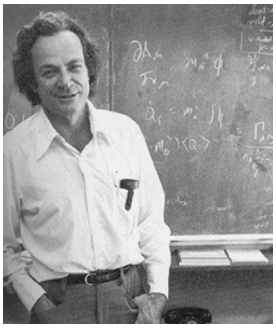
Tabela 12.7.1 Osobine kvarkova

Vrsta	Simbol	Antičestica	Naelektrisanje (e)	Spin ($\hbar$)	Barionski broj	Masa mirovanja* (GeV/c^2)	Osobine			
							C	S	T	B
u-kvark	u	$\bar{u}$	+2/3	1/2	+1/3	0,3	0	0	0	0
d-kvark	d	$\bar{d}$	–1/3	1/2	+1/3	0,3	0	0	0	0
c-kvark	c	$\bar{c}$	+2/3	1/2	+1/3	+1,5	+1	0	0	0
s-kvark	s	$\bar{s}$	–1/3	1/2	+1/3	0,5	0	–1	0	0
t-kvark	t	$\dot{t}$	+2/3	1/2	+1/3	180	0	0	+1	0
b-kark	b	$\bar{b}$	–1/3	1/2	+1/3	4,7	0	0	0	–1
$\bar{u}$ -kvark	$\bar{u}$	u	–2/3	1/2	–1/3	0,3	0	0	0	0
$\bar{d}$ -kvark	$\bar{d}$	d	+1/3	1/2	–1/3	0,3	0	0	0	0
$\bar{c}$ -kvark	$\bar{c}$	c	–2/3	1/2	–1/3	1,5	–1	0	0	0
$\bar{s}$ -kvark	$\bar{s}$	s	+1/3	1/2	–1/3	0,5	0	+1	0	0
$\dot{t}$ -kvark	$\dot{t}$	t	–2/3	1/2	–1/3	180	0	0	–1	0
$\bar{b}$ -kvark	$\bar{b}$	b	+1/3	1/2	–1/3	4,7	0	0	0	+1

* Mase mirovanja odnose se na kvarkove vezane u česticama (izgrađivačke kvarkove). Energije mirovanja slobodnih kvarkova nisu poznate.

Standardni model unapredio je fiziku subatomskih čestica (na energijskoj skali koja je danas dostupna istraživačima) u meri koja je uporediva sa napretkom u hemiji ostvarenim otkrićem periodnog sistema elemenata. Skoro svi eksperimenti mogu da se objasne preko standardnog modela. Skoro, jer ima nagoveštaja, kako eksperimentalnih tako i teorijskih, da postoje pojave koje se ne uklapaju u okvire standardnog modela. Na primer, japanski istraživači saopštili su da su opazili oscilacije mionskih neutrina (prelaz mionskog neutrina u elektronski i obrnuto) čija je direktna posledica, vrlo mala, ali konačna masa mirovanja neutrina. To je u direktnoj suprotnosti sa jednom od osnovnih pretpostavki standardnog modela prema kojoj je masa mirovanja svih neutrina jednaka nuli. Dakle, uprkos ogromnom uspehu modela, intenzivno se radi na pronalaženju njegovih slabosti i njegovom prevazilaženju novom „teorijom svačega".

Murai Gel-Man (Murrau Gel-Mann), rođen je u Njujorku 1929. godine. Diplomirao je na čuvenom Jelu (Yale) a doktorirao na Masačusetskom tehnološkom institutu (MIT, Massachusets Institute of Technology). Godine 1952. počinje da radi u Institutu za nuklearne studije u Čikagu. Izučava elementarne čestice, razvija teoriju elementarnih čestica i predlaže model za njihovu klasifikaciju. Od njega potiče duhoviti naziv za osnovnu „bit" česticu iz koje nastaju sve ostale, „kvark" (inače reč kvark ne znači ništa i Gel-Man ju je uzeo iz romana *Fineganovo buđenje* Džemsa Džojsa). M. Gel-Man je 1969. godine nagrađen Nobelovom nagradom za fiziku za rad na klasifikaciji subatomskih čestica i njihovih interakcija. Hipoteza kvarkova je potvrđena kasnije, prvo otkrićem tzv. Omega (–) čestice.



Ričard Fejnman (Richard Feynman, 1918–1988). Diplomirao je na čuvenom MIT-u a doktorirao na Univerzitetu Prinston (Princeton). Kasnije postoje profesor fizike na Kalifornijskom institutu za tehnologiju u Pasadeni. Već 1945, kao mlad fizičar bio je uključen u nuklearni program „Menhetn". Potom se bavio elektrodinamikom i nuklearnom fizikom. Izumeo je način da predstavi kvantne interakcije, tzv. „Fejnmanove dijagrame" i u izvesnom smislu preformulisao kvantnu elektrodinamiku. Godine 1965. dobio je Nobelovu nagradu za fiziku za fundamentalni doprinos kvantnoj elektrodinamici sa velikim posledicama po fiziku elementarnih čestica. Bio je pasionirani profesor, voleo je da podučava studente. I danas su „Fejnmanova predavanja iz fizike", inspiracija i za studente i za profesore.

PERIODNI SISTEM ELEMENATA

I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII	
									1 **H** 1.008								2 He 4,03	**1**
1	**2**											**13**	**14**	**15**	**16**	**17**	**18**	
3 **Li** 22.99	4 **Be** 9,01											5 **B** 10,81	6 **C** 12,01	7 **N** 14,01	8 **O** 16,00	9 **F** 19,00	10 **Ne** 20,18	**2**
11 **Na** 22,99	12 **Mg** 24,31	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**	**11**	**12**	13 **Al** 26,98	14 **Si** 28,09	15 **P** 30,97	16 **S** 32,06	17 **Cl** 35,45	18 **Ar** 39,95	**3**
19 **K** 39,10	20 **Ca** 40,08	21 **Sc** 44,96	22 **Ti** 47,90	23 **V** 50,94	24 **Cr** 52,01	25 **Mn** 59,94	26 **Fe** 55,85	27 **Co** 58,93	28 **Ni** 58,71	29 **Cu** 63,54	30 **Zn** 65,37	31 **Ga** 69,72	32 **Ge** 72,59	33 **As** 74,96	34 **Se** 78,96	35 **Br** 79,91	36 **Kr** 83,80	**4**
37 **Rb** 85,47	38 **Sr** 87,62	39 **Y** 88,91	40 **Zr** 91,22	41 **Nb** 92,91	42 **Mo** 95,9	43 **Tc** 98,91	44 **Ru** 101,07	45 **Rh** 102,91	46 **Pd** 102,91	47 **Ag** 107,87	48 **Cd** 112,40	49 **In** 114.82	50 **Sn** 118.69	51 **Sb** 121.75	52 **Te** 127,60	53 **I** 126,90	54 **Xe** 131,30	**5**
55 **Cs** 132,91	56 **Ba** 137,34	71 **Lu** 174,97	72 **Hf** 178,49	73 **Ta** 185	74 **W** 183,85	75 **Re** 186,2	76 **Os** 190,2	77 **Ir** 192,2	78 **Pt** 195,09	79 **Au** 196,97	80 **Hg** 200,95	81 **Tl** 204,37	82 **Pb** 207,19	83 **Bi** 208.98	84 **Po** 210	85 **At** 210	86 **Rn** 222	**6**
87 **Fr** 223	88 **Ra** 226,03	103 **Lr** 157	104 **Unq**	105 **Unp**	106 **Unh**	107 **Uns**	108 **Uno**	109 **Une**	110 **Uun**	111 **Uuu**	112 **Uub**		114 **Uuk**		116		118	**7**

Lantanoidi	57 **La** 138,91	58 **Ce** 140,12	59 **Pr** 140,91	60 **Nd** 140,24	61 **Pm** 146,92	62 **Sm** 150,35	63 **Eu** 151,96	64 **Gd** 157,25	65 **Tb** 158,92	66 **Dy** 162,50	67 **Ho** 164,93	68 **Er** 167,26	69 **Tm** 168,93	70 **Yb** 173,04
Aktinoidi	89 **Ac** 227,03	90 **Th** 232,04	91 **Pa** 231,04	92 **U** 238,03	93 **Np** 237,05	94 **Pu** 239,05	95 **Am** 241,06	96 **Cm** 247,07	97 Bk 249,08	98 **Cf** 251,08	99 **Es** 254,09	100 **Fm** 257,10	101 **Md** 258,10	102 **No** 255

PREPORUČENE VREDNOSTI OSNOVNIH FIZIČKIH KONSTANTI

Podaci iz 1986. CODATA preporučenih vrednosti fundamentalnih fizičkih konstanti, verzija 0.91

Brzina svetlosti u vakuumu		©	299792458 m s^{-1}
Permeabilnost vakuuma		(μ_0)	1.25663706143592 10^{-06} N A^{-2}
Permitivnost vakuuma		(ε_0)	8.854187817 10^{-12} F m^{-1}
Gravitaciona konstanta		(G)	6.6725985 10^{-11} ± 8.00712 10^{-16} m^3 kg^{-1} s^{-2}
Plankova konstanta		(h)	6.62607554 10^{-34} ± 3.97565 10^{-40} J s
	u elektronvoltima		4.135669212 10^{-15} ± 1.2407 10^{-21} eV s
h precrtano		(ħ)	1.0545726663 10^{-34} ± 6.32744 10^{-41} J s
	u elektronvoltima		6.58212202 10^{-16} ± 1.97464 10^{-22} eV s
Plankova masa		(m_p)	2.1767114 10^{-08} ± 1.30603 10^{-13} kg
Plankova dužina		(I_p)	1.616051 10^{-35} ± 9.69631 10^{-41} m
Plankovo vreme		(t_p)	5.3905634 10^{-44} ± 3.23434 10^{-49} s
Elementarno naelektrisanje		(e)	1.6021773349 10^{-19} ± 4.80653 10^{-26} C
Borov magneton		(μ_B)	9.274015431 10^{-24} ± 2.7822 10^{-30} J T^{-1}
	u elektronvoltima		5.7883826352 10^{-05} ± 4.63071 10^{-12} eV T^{-1}
	u hercima		13996241842 ±4198.87 T^{-1} s^{-1}
	u talasnim brojevima		46.68643714 ± 1.40059 10^{-05} m^{-1} T^{-1}
	u kelvinima		0.671709957 ± 5.37368 10^{-06} K T^{-1}

Nuklearni magneton		(μ_N)	$5.050786617\ 10^{-27} \pm 1.51524\ 10^{-33}$ J T $^{-1}$
	u elektronvoltima		$3.1524516628\ 10^{-08} \pm 2.52196\ 10^{-15}$ eV T $^{-1}$
	u hercima		7622591.423 ± 2.28678 T $^{-1}$ s^{-1}
	u talasnim brojevima		$0.025426228177 \pm 7.62787\ 10^{-09}$ m^{-1} T $^{-1}$
	u kelvinima		$0.000365824631 \pm 2.9266\ 10^{-09}$ K T $^{-1}$
Konstanta fine strukture		(α)	$0.0072973530833 \pm 2.91894\ 10^{-10}$
Inverzna vrednost konstante fine strukture			$137.035989561 \pm 5.48144\ 10^{-06}$
Ridbergova konstanta		(Ry)	$10973731.53413 \pm 0.0109737$ m^{-1}
	u hercima		$3.289841949939\ 10^{+15} \pm 3.28984\ 10^{+6}$ s^{-1}
	u džulima		$2.179874113\ 10^{-18} \pm 1.30792\ 10^{-24}$ J
	u elektronvoltima		$13.60569814 \pm 4.08171\ 10^{-06}$ eV
Borov radijus		(a_o)	$5.2917724924\ 10^{-11} \pm 2.11671\ 10^{-18}$ m
Masa elektrona		(m_e)	$9.109389754\ 10^{-31} \pm 4.55469\ 10^{-37}$ kg
	u atomskim jedinicama		$0.00054857990313 \pm 1.09716\ 10^{-11}$
	u elektronvoltima		510999.0615 ± 0.1533 eV
Odnos masa elektrona i miona			$0.0048363321871 \pm 4.83633\ 10^{-10}$
Odnos masa elektrona i protona			$0.00054461701311 \pm 1.08923\ 10^{-11}$
Odnos masa elektrona i deuterona			$0.0002724437076 \pm 5.44887\ 10^{-12}$
Odnos masa elektrona i alfa--čestice			$0.0001370933543 \pm 2.74187\ 10^{-12}$
Specifično naelektrisanje elektrona			$-175881962530 \pm -52764.6$ C kg^{-1}
Molarna masa elektrona			$5.4857990313\ 10^{-07} \pm 1.09716\ 10^{-14}$ kg mol^{-1}

Elektronska Komptonova talasna dužina		(λc)	$2.4263105822\ 10^{-12} \pm 1.94105\ 10^{-19}$ m
Elektronska Komptonova talasna dužina/2π		(λc)	$3.8615932335\ 10^{-13} \pm 3.08927\ 10^{-20}$ m
Klasični radijus elektrona		(r_e)	$2.8179409238\ 10^{-15} \pm 2.81794\ 10^{-22}$ m
Magnetni moment elektrona			$9.284770131\ 10^{-24} \pm 2.78543\ 10^{-30}$ J T $^{-1}$
	u Borovim magnetonima		1.0011596521931
	u nuklearnim magnetonima		$1838.28200037 \pm 3.67656\ 10^{-05}$
g-faktor elektrona		(g_e)	2.0023193043862
Odnos magnetnih momenata elektrona i miona			$206.7669673 \pm 2.06767\ 10^{-05}$
Odnos magnetnih momenata elektrona i protona			$658.210688166 \pm 6.58211\ 10^{-06}$
Masa miona			$1.883532711\ 10^{-28} \pm 1.13012\ 10^{-34}$ kg
	u atomskim jedinicama		$0.11342891317 \pm 1.13429\ 10^{-08}$ u
	u elektronvoltima		105658389.34 ± 31.6975 eV
Odnos masa miona i elektrona			$206.7682623 \pm 2.06768\ 10^{-05}$
Molarna masa miona			$0.00011342891317 \pm 1.134.29\ 10^{-11}$ kg mol^{-1}
Magnetni moment miona			$4.490451415\ 10^{-26} \pm 1.34714\ 10^{-32}$ J T $^{-1}$
	u Borovim magnetonima		$0.0048419709771 \pm 4.84197\ 10^{-10}$
	u nuklearnim magnetonima		$8.890598113 \pm 8906\ 10^{-07}$
g-faktor miona		(g_μ)	$2.00233184617 \pm 1.60187\ 10^{-08}$
Odnos magnetnih momenata miona i protona			$3.1833454747 \pm 3.18335\ 10^{-07}$

Masa protona		(m_p)	$1.67262311\ 10^{-27} \pm 8.36312\ 10^{-34}$ kg
	u atomskim jedinicama		$1.00727647012 \pm 1.00728\ 10^{-08}$ u
	u elektronvoltima		938272312.8 ± 281.482 eV
Odnos masa protona i elektrona			$1836.15270137 \pm 3.67231\ 10^{-05}$
Odnos masa protona i miona			$8.880244413 \pm 8.88024\ 10^{-07}$
Specifično naelektrisanje protona			95788309.29 ± 28.7365 C kg^{-1}
Molarna masa protona			$0.00100727647012 \pm 1.00728\ 10^{-11}$ kg mol^{-1}
Protonska Komptonova talasna dužina		(λ_{Cp})	$1.3214100212\ 10^{-15} \pm 1.05713\ 10^{-22}$ m
Magnetni moment protona			$1.4106076147\ 10^{-26} \pm 4.23182\ 10^{-33}$ J T^{-1}
	u Borovim magnetonima		$0.00152103220215 \pm 1.52103\ 10^{-11}$
	u nuklearnim magnetonima		$2.79284738663 \pm 5.58569\ 10^{-08}$
Žiromagnetni odnos protona		(Y_p)	267522128.81 ± 80.2566 T^{-1} s^{-1}
		($Y_p/2\pi$)	42577469.13 ± 12.7732 T^{-1} s^{-1}
Masa neutrona		(m_n)	$1.67492861\ 10^{-27} \pm 8.37464\ 10^{-34}$ kg
	u atomskim jedinicama		$1.00866490414 \pm 1.00866\ 10^{-08}$ u
	u elektronvoltima		939565632.8 ± 281.87 eV
Odnos masa neutrona i elektrona			$1838.6836624 \pm 3.67737\ 10^{-05}$
Odnos masa neutrona i protona			1.0013784049
Molarna masa neutrona			$0.00100866490414 \pm 1.00866\ 10^{-11}$ kg mol^{-1}
Neutronska Komptonova talasna dužina		(λ_{Cn})	$1.3195911012\ 10^{-15} \pm 1.05567\ 10^{-22}$ m

Magnetni moment neutrona			$9.66237074\ 10^{-27} \pm 3.86495\ 10^{-33}$ J T $^{-1}$
	u Borovim magnetonima		$0.0010418756325 \pm 2.08375\ 10^{-10}$
	u nuklearnim magnetonima		$1.9130427545 \pm 3.82609\ 10^{-07}$
Odnos magnetnih momenata neutrona i elektrona			$0.0010406688225 \pm 2.08134\ 10^{-10}$
Odnos magnetnih momenata neutrona i protona			$0.6849793416 \pm 1.36996\ 10^{-07}$
Masa deuterona		(m_d)	$3.34358602\ 10^{-27} \pm 1.67179\ 10^{-33}$ kg
	u atomskim jedinicama		$2.01355321424 \pm 2.01355\ 10^{-08}$ u
	u elektronvoltima		1875613395.7 ± 562.684 eV
Odnos masa deuterijuma i elektrona			$3670.48301475 \pm 7.34097\ 10^{-05}$
Odnos masa deuterona i protona			1.9990074966
Molarna masa deuterona			$0.00201355321424 \pm 2.01355\ 10^{-11}$ kg mol^{-1}
Magnetni moment deuterona		(μ_d)	$4.330737515\ 10^{-27} \pm 1.29922\ 10^{-33}$ J T $^{-1}$
	u Borovim magnetonima		$0.000466975447991 \pm 4.66975\ 10^{-12}$
	u nuklearnim magnetonima		$0.85743823024 \pm 1.71488\ 10^{-08}$
Odnos magnetnih momenata deuterona i elektrona			$0.000466434546091 \pm 4.66435\ 10^{-12}$
Odnos magnetnih momenata deuterona i protona			$0.307012203551 \pm 3.07012\ 10^{-09}$
Avogadrov broj		(N_A)	$6.022136736\ 10^{+23} \pm 3.01107\ 10^{+17}$ mol^{-1}

Atomska jedinica mase		(m_u)	$1.66054021\ 10^{-27} \pm 8.3027\ 10^{-34}$ kg
	eV		931494322.8 ± 279.448 eV
Faradejeva konstanta		(F)	96485.30929 ± 0.0289456 C mol^{-1}
Molarna gasna konstanta		(R)	$8.3145107 \pm 6.65161\ 10^{-05}$ J mol^{-1} K^{-1}
Bolcmanova konstanta		(k)	$1.38065812\ 10^{-23} \pm 1.10453\ 10^{-28}$ J K^{-1}
	u elektronvoltima		$8.61738573\ 10^{-05} \pm 6.89391\ 10^{-10}$ eV K^{-1}
	u hercima		20836741800 ± 166694 K^{-1} s^{-1}
	u talasnim brojevima		69.5038759 ± 0.000556031 m^{-1} K^{-1}
Molarna zapremina (idealnog gasa) STP		(V_m)	$0.0224141019 \pm 1.79313\ 10^{-07}$ m^3 mol^{-1}
Losmitov broj		(n_0)	$2.68676323\ 10^{+25} \pm 2.14941\ 10^{+20}$ m^{-3}
Štefan--Bolcmanova konstanta		(σ)	$5.6705119\ 10^{-08} \pm 1.70115\ 10^{-13}$ W m^{-2} K^{-4}
Prva radijaciona konstanta		(c_1)	$3.741774922\ 10^{-16} \pm 2.24506\ 10^{-22}$ W m^2
Druga radijaciona konstanta		(c_2)	$0.0143876912 \pm 1.15102\ 10^{-07}$ m K
Konstanta Vinovog zakona pomeraja		(b)	$0.00289775624 \pm 2.3182\ 10^{-08}$ m K
Elektronvolt		(eV)	$1.6021773349\ 10^{-19} \pm 4.80653\ 10^{-26}$ J
Standardna atmosfera		(atm)	101325 Pa
Standardno ubrzanje Zemljine teže		(g_n)	9.80665 m s^{-2}

FIZIČKE OSOBINE ELEMENATA

red. broj	hem. simbol	gustina kg/m^3	T_t K	T_k K	ΔH_{top} kJ/mol	ΔH_{isp} kJ/mol	top. prov. W/(K)(m)
1	H	76.	14.01	20.28	0.12	0.46	0.1815
2	He	124.8	0.95	4.216	0.021	0.082n	0.152
3	Li	534.	453.69	1620.	4.6	147.7	84.7
4	Be	1847.7	1551.	3243.	9.8	308.8	200.
5	B	2340.	2573.	3931.	22.2	504.5	27.
6	C	3513.	3820.	5100.	105.	710.9	1960.
7	N	1026.	63.29	77.4	0.72	5.577	0.02598
8	O	2000.	54.8	90.19	0.444	6.82	0.02674
9	F	1516.	53.53	85.01	1.02	3.26	0.0279
10	Ne	1444.	24.48	27.1	0.324	1.736	0.0493
11	Na	971.	370.96	1156.1	2.64	99.2	141.
12	Mg	1738.	922.	1363.	9.04	127.6	156.
13	Al	2698.	933.5	2740.	10.67	290.8	237.
14	Si	2329.	1683.	2628.	39.6	383.3	148
15	P	1820.	317.3	553.	2.51	51.9	0.235
16	S	2070.	386.	717.824	1.23	9.62	0.269
17	Cl	2030.	172.2	239.6	6.41	20.4033	0.0089
18	Ar	1656.	83.8	87.3	1.21	6.53	0.01772
19	K	862.	336.8	1047.	2.4	79.1	102.4
20	Ca	1550.	1112.	1757.	9.33	150.6	200.
21	Sc	2989.	1814.	3104.	15.9	376.1	15.8
22	Ti	4540.	1933.	3560.	20.9	425.5	21.9
23	V	6110.	2160.	3650.	17.6	459.7	30.7
24	Cr	7190.	2130.	2945.	15.3	341.8	93.7
25	Mn	7440.	1517.	2235.	14.4	220.5	7.82
26	Fe	7874.	1808.	3023.	14.9	340.2	80.2
27	Co	8900.	1768.	3143.	15.2	382.4	100.
28	Ni	8902.	1726.	3005.	17.6	374.8	90.7
29	Cu	8960.	1356.6	2840	13.	306.7	401.
30	Zn	7133.	692.73	1180.	6.67	114.2	116.
31	Ga	5907.	302.93	2676.	5.59	270.3	40.6
32	Ge	5323.	1210.6	3103.	34.7	327.6	59.9
33	As	5780.	83.78	889	27.7	31.9	50.
34	Se	4790.	490.	958.1	5.1	90.	2.04
35	Br	4050.	265.9	331.9	10.8	30.5	0.122
36	Kr	2823.	116.6	120.85	1.64	9.05	0.00949
37	Rb	1532.	312.2	961.	2.2	75.7	58.2

red. broj	hem. simbol	gustina kg/m^3	T_t K	T_k K	ΔH_{top} kJ/mol	ΔH_{isp} kJ/mol	top. prov. W/(K)(m)
38	Sr	2540.	1042.	1657	9.16	154.4	35.3
39	Y	4469.	1795.	3611.	17.2	367.4	17.2
40	Zr	6506.	2125.	4650.	23.	566.7	22.7
41	Nb	8570.	2741.	5015.	27.2	680.19	53.7
42	Mo	10220.	2890.	4885.	27.6	589.9	138.
43	Tc	11500.	2445.	5150.	23.81	585.22	50.6
44	Ru	12370.	2583.	4173.	23.7	567.	117.
45	Rh	12410.	2239.	4000.	21.55	494.34	150.
46	Pd	12020.	1825.	3413.	17.2	361.5	71.8
47	Ag	10500.	1235.08	2485.	11.3	257.7	429.
48	Cd	8650.	594.1	1038.	6.11	100.	96.8
49	In	7310.	429.32	2353.	3.27	231.8	81.6
50	Sn	7310.	505.118	2543.	7.2	296.2	66.6
51	Sb	6691.	903.89	1908.	20.9	165.8	243.
52	Te	6240.	722.7	1263.	13.5	104.6	2.35
53	I	4930.	386.7	457.5	15.27	41.67	0.449
54	Xe	3540.	161.3	166.1	3.1	12.65	0.00569
55	Cs	1873.	301.55	951.6	2.09	66.5	35.9
56	Ba	3594.	1002.	1910.	7.66	150.9	18.4
57	La	6145.	1194.	3730.	10.04	402.1	13.5
58	Ce	8240.	1072.	3699.	8.87	398.	11.4
59	Pr	6773.	1204.	3785.	11.3	357.	12.5
60	Nd	7007.	1294.	3341.	7.113	328.	16.5
61	Pm	7220.	1441.	3000.	12.6	?	17.9
62	Sm	7520.	1350.	2064.	10.9	164.8	13.3
63	Eu	5243.	1095.	1870.	10.5	176.	13.9
64	Gd	7900.4	1586.	3539.	15.5	301.	10.6
65	Tb	8229.	1629.	3396.	16.3	391.	11.1
66	Dy	8550.	1685.	2835.	17.2	293.	10.7
67	Ho	8795.	1747.	2968.	17.2	303.	16.2
68	Er	9066.	1802.	3136.	17.2	280.	14.3
69	Tm	9321.	1818.	2220.	18.4	247.	16.8
70	Yb	6965.	1097.	1466.	9.2	159.	34.9
71	Lu	9840.	1936.	3668.	19.2	428.	16.4
72	Hf	13310.	2503.	5470.	25.5	570.7	23.
73	Ta	16654.	3269.	5698.	31.4	758.22	57.5
74	W	19300.	3680.	5930.	35.2	824.2	174.
75	Re	21020.	3453.	5900.	33.1	704.25	47.9
76	Os	22590.	3327.	5300.	29.3	738.06	87.6
77	Ir	22420.	2683.	4403.	26.4	612.1	147.
78	Pt	21450.	2045.	4100.	19.7	469.	71.6
79	Au	19320.	1337.58	3080.	12.7	343.1	317.
80	Hg	13546.	234.28	629.73	2.331	59.11	8.34
81	Tl	11850.	576.6	1730.	4.31	166.1	46.1
82	Pb	11350.	600.65	2013.	5.121	177.8	35.3
83	Bi	9747.	544.5	1883.	10.48	179.1	7.87
84	Po	9320.	527.	1235.	10.	100.8	20.
85	At	?	575.	610.	23.8	?	1.7
86	Rn	4400.	202.	211.4	2.7	18.1	0.00364
87	Fr	?	300.	950.	?	?	15.
88	Ra	5000.	973.	1413.	7.15	136.7	18.6
89	Ac	10060.	1320.	3470.	14.2	293	12.
90	Th	11720.	2023.	5060.	19.2	513.67	54.
91	Pa	15370.	2113.	4300.	16.7	481.	47.
92	U	18950.	1405.5	4018.	15.5	417.1	27.6
93	Np	20250.	913.	4175.	9.46	336.6	6.3

red. broj	hem. simbol	gustina kg/m^3	T_t K	T_k K	ΔH_{top} kJ/mol	ΔH_{isp} kJ/mol	top. prov. W/(K)(m)
94	Pu	19840.	914.	3505.	2.8	343.5	6.74
95	Am	13670.	1267.	2880.	14.4	238.5	10.
96	Cm	13300.	1610.	?	?	?	10.
97	Bk	14790.	?	?	?	?	10.
98	Cf	?	?	?	?	?	10.
99	Es	?	?	?	?	?	10.
100	Fm	?	?	?	?	?	10.
101	Md	?	?	?	?	?	10.
102	No	?	?	?	?	?	10.
103	Lr	?	?	?	?	?	10.
104	Unq	?	?	?	?	?	?
105	Unp	?	?	?	?	?	?
106	Unh	?	?	?	?	?	?

Gustina vodonika na 11 K.
Gustina tečnog helijuma na 4 K.
Gustina dijamanta.
Toplotna provodljivost grafita.
Gustina kiseonika na 55 K.
Toplota isparavanja za P_4 oblik fosfora.
Gustina je za P_4 oblik fosfora.
Gustina je za alfa-oblik sumpora.
Gustina je za tečni fluor na 85 K.
Toplotna provodljivost gasovitog vodonika.
Toplotna provodljivost gasovitog helijuma.
Tačka topljenja dijamanta.
Gustina azota na 2,1 K.
Tačka topljenja je za P_4 oblik fosfora.
Tačka ključanja je za P_4 oblik fosfora.
Toplota topljenja je za P_4 oblik fosfora.
Tačka topljenja je za alfa-oblik sumpora.
Gustina je za tečni radon na 211 K.

STANDARDNE ATOMSKE TEŽINE KOJE PREPORUČUJE IUPAC

Broj u okrugloj zagradi predstavlja neizvesnost na poslednjoj cifri. Broj u uglastoj zagradi je maseni broj najduže živećeg izotopa elementa koji nema stabilnih izotopa i za koji standardna atomska težina ne može da se definiše.

1	H	Hidrogen	1.00794(7)	54	Xe	Ksenon	131.29(2)
2	He	Helijum	4.002602(2)	55	Cs	Cezijum	132.90543(5)
3	Li	Litijum	6.941(2)	56	Ba	Barijum	137.327(7)
4	Be	Berilijum	9.012182(3)	57	La	Lantan	138.9055(2)
5	B	Bor	10.811(5)	58	Ce	Cer	140.115(4)
6	C	Karbon	12.011(1)	59	Pr	Prazeodim	140.90765(3)
7	N	Nitrogen	14.00674(7)	60	Nd	Neodim	144.24(3)
8	O	Oksigen	15.9994(3)	61	Pm	Prometijum	[145]
9	F	Fluor	18.9984032(9)	62	Sm	Samarijum	150.36(3)
10	Ne	Neon	20.1797(6)	63	Eu	Evropijum	151.965(9)
11	Na	Natrijum	22.989768(6)	64	Gd	Gadolinijum	157.25(3)
12	Mg	Magnezijum	24.3050(6)	65	Tb	Terbijum	158.92534(3)
13	Al	Aluminijum	26.981539(5)	66	Dy	Disprozijum	162.50(3)
14	Si	Silicijum	28.0855(3)	67	Ho	Holmijum	164.93032(3)
15	P	Fosfor	30.973762(4)	68	Er	Erbijum	167.26(3)
16	S	Sumpor	32.066(6)	69	Tm	Tulijum	168.93421(3)
17	Cl	Hlor	35.4527(9)	70	Yb	Iterbijum	173.04(3)
18	Ar	Argon	39.948(1)	71	Lu	Lutecijum	174.967(1)
19	K	Kalijum	39.0983(1)	72	Hf	Hafnijum	178.49(2)
20	Ca	Kalcijum	40.078(4)	73	Ta	Tantal	180.9479(1)
21	Sc	Skandijum	44.955910(9)	74	W	Volfram	183.84(1)
22	Ti	Titanijum	47.867(1)	75	Re	Renijum	186.207(1)
23	V	Vanadijum	50.9415(1)	76	Os	Osmijum	190.23(3)
24	Cr	Hrom	51.9961(6)	77	Ir	Iridijum	192.217(3)
25	Mn	Mangan	54.93805(1)	78	Pt	Platina	195.08(3)
26	Fe	Gvožđe	55.845(2)	79	Au	Zlato	196.96654(3)
27	Co	Kobalt	58.93320(1)	80	Hg	Živa	200.59(2)
28	Ni	Nikal	58.6934(2)	81	Tl	Talijum	204.3833(2)
29	Cu	Bakar	63.546(3)	82	Pb	Olovo	207.2(1)
30	Zn	Cink	65.39(2)	83	Bi	Bizmut	208.98037(3)
31	Ga	Galijum	69.723(1)	84	Po	Polonijum	[209]
32	Ge	Germanijum	72.61(2)	85	At	Astat	[210]
33	As	Arsen	74.92159(2)	86	Rn	Radon	[222]
34	Se	Selen	78.96(3)	87	Fr	Francijum	[223]

35	Br	Brom	79.904(1)	88	Ra	Radijum	[226]
36	Kr	Kripton	83.80(1)	89	Ac	Aktinijum	[227]
37	Rb	Rubidijum	85.4678(3)	90	Th	Torijum	232.0381(1)
38	Sr	Stroncijum	87.62(1)	91	Pa	Protaktinijum	231.03588(2)
39	Y	Itrijum	88.90585(2)	92	U	Uranijum	238.0289(1)
40	Zr	Cirkonijum	91.224(2)	93	Np	Neptunijum	[237]
41	Nb	Niobijum	92.90638(2)	94	Pu	Plutonijum	[244]
42	Mo	Molibden	95.94(1)	95	Am	Americijum	[243]
43	Tc	Tehnecijum	[98]	96	Cm	Kirijum	[247]
44	Ru	Rutenijum	101.07(2)	97	Bk	Berklijum	[247]
45	Rh	Rodijum	102.90550(3)	98	Cf	Kalifornijum	[251]
46	Pd	Paladijum	106.42(1)	99	Es	Ajnstajnijum	[252]
47	Ag	Srebro	107.8682(2)	100	Fm	Fermijum	[257]
48	Cd	Kadmijum	112.411(8)	101	Md	Mendeljevijum	[258]
49	In	Indijum	114.818(3)	102	No	Nobelijum	[259]
50	Sn	Kalaj	118.710(7)	103	Lr	Lorencijum	[262]
51	Sb	Antimon	121.760(1)	104	Rf	Raderfordijum	[261]
52	Te	Telur	127.60(3)	105	Ha	Hanijum	[262]
53	J	Jod	126.90447(3)				

Lista je navedena prema izveštaju IUPAC-a objavljenog u časopisu ”Pure and Applied Chemistry”, Vol. 66, No. 12 (1994), str. 2423–2444, 1997, IUPAC: 104-[Rf] Rutherfordium; 105–[Sg] Seaborgium; 107-[Bh] Bohrium; 108-[Hs] Hassium; 109-[Mt] Meitnerium; 110-?

OSOBINE STABILNIH JEZGARA

A	Z	I	M-A	% rasprostr.
1	0	1/2	+8·07144	
1	1	1/2	+7·28899	99·985
2	1	1	+13·136	0·015
3	2	1/2	+14·931	0·00013
4	2	0	+2·425	100
6	3	1	+14·088	7·4
7	3	3/2	+14·907	92·6
9	4	3/2	+11·350	100
10	5	3	+12·052	18·8
11	5	3/2	+8·668	81·2
12	6	0	0(standard)	98·89
13	6	1/2	+3·125	1·11
14	7	1	+2·864	99·63
15	7	1/2	+0·100	0·37
16	8	0	-4·737	99·759
17	8	5/2	-0·808	0·037
18	8	0	-0·782	0·204
19	9	1/2	-1·486	100
20	10	0	-7·041	90·8
21	10	3/2	-5·730	0·26
22	10	0	-8·025	8·9
23	11	3/2	-9·528	100
24	12	0	-13·933	78·8
25	12	5/2	-13·191	10·1
26	12	0	-16·214	11·1

A	Z	I	M-A	% rasprostr.
27	13	5/2	-17·196	100
28	14	0	-21·490	92·17
29	14	1/2	-21·894	4·71
30	14	0	-24·439	3·12
31	15	1/2	-24·438	100
32	16	0	-26·013	95
33	16	3/2	-26·583	0·75
34	16	0	-29·933	4·2
36	16	0	-30·655	0·017
35	17	3/2	-29·014	75·53
37	17	3/2	-31·765	24·47
36	18	0	-30·232	0·337
38	18	0	-34·718	0·063
40	18	0	-35·038	99·60
39	19	3/2	-33·803	93·2
40	19	4	-33·533	0·0119
41	19	3/2	-35·552	6·8
40	20	0	-34·848	96·9
42	20	(0)	-38·540	0·64
43	20	7/2	-38·396	0·14
44	20	(0)	-41·460	2·1
46	20	(0)	-43·138	0·0032
48	20	(0)	-44·216	0·18
45	21	7/2	-41·061	100
46	22	(0)	-44·123	8·0
47	22	5/2	-44·927	7·4
48	22	(0)	-48·483	73·8
49	22	7/2	-48·558	5·5
50	22	(0)	-51·431	5·3
50	23	6	-49·216	0·25
51	23	7/2	-52·199	99·75
50	24	(0)	-50·249	4·4
52	24	(0)	-55·411	83·7
53	24	3/2	-55·281	9·5
54	24	(0)	-56·930	2·4
55	25	5/2	-57·705	100
54	26	(0)	-56·245	5·9

A	Z	I	M-A	% rasprostr.
56	26	(0)	-60·605	91·6
57	26	1/2	-60·175	2·20
58	26	(0)	-62·146	0·33
59	27	7/2	-62·233	100
58	28	(0)	-60·288	68·0
60	28	(0)	-64·471	26·2
61	28	3/2	-64·220	1·1
62	28	(0)	-66·748	3·7
64	28	(0)	-67·106	1·0
63	29	3/2	-65·583	69·0
65	29	3/2	-67·266	31·0
64	30	0	-66·000	48·9
66	30	0	-68·881	27·8
67	30	5/2	-67·863	4·1
68	30	0	-69·994	18·6
70	30	(0)	-69·550	0·63
69	31	3/2	-69·326	60·1
71	31	3/2	-70·135	39·9
70	32	0	-70·558	20·5
72	32	0	-72·579	27·4
73	32	9/2	-71·293	7·8
74	32	0	-73·418	36·5
76	32	0	-73·209	7·8
75	33	3/2	-73·031	100
74	34	0	-72·212	0·93
76	34	0	-75·257	9·1
77	34	1/2	-74·601	7·5
78	34	0	-77·020	23·6
80	34	0	-77·753	49·9
82	34	0	-77·586	9·0
79	35	3/2	-76·075	50·6
81	35	3/2	-77·972	49·4
78	36	(0)	-74·143	0·35
80	36	(0)	-77.891	2·27
82	36	0	-80·589	11·6
83	36	9/2	-79·985	11·5
84	36	0	-82·433	57·0

A	Z	I	M-A	% rasprostr.
86	36	0	-83·259	17·3
85	37	5/2	-82·156	72·2
87	37	3/2	-84·591	27·8
84	38	(0)	-80·638	0·55
86	38	0	-84·499	9·8
87	38	9/2	-84·865	7·0
88	38	0	-87·894	82·7
89	39	1/2	-87·678	100
90	40	(0)	-88·770	51·5
91	40	5/2	-87·893	11·2
92	40	(0)	-88·462	17·1
94	40	(0)	-87·267	17·4
96	40	(0)	-85·430	2·8
93	41	9/2	-87·203	100
92	42	0	-86·804	15·7
94	42	0	-88·406	9·3
95	42	5/2	-87·709	15·7
96	42	0	-88·794	16·5
97	42	5/2	-87·539	9·5
98	42	0	-88·110	23·8
100	42	0	-86·185	9·5
	43	nema stab. izotopa		
96	44	(0)	-86·071	5·6
98	44	(0)	-88·221	1·9
99	44	5/2	-87·619	12·7
100	44	(0)	-89·219	12·7
101	44	5/2	-87·953	17·0
102	44	(0)	-89·098	31·5
104	44	(0)	-88·090	18·6
103	45	1/2	-88·014	100
102	46	(0)	-87·923	1·0
104	46	(0)	-89·411	11·0
105	46	5/2	-88·431	22·2
106	46	(0)	-89·907	27·3
108	46	(0)	-89·524	26·7
110	46	(0)	-88·338	11·8
107	47	1/2	-88·403	51·4

A	Z	I	M-A	% rasprostr.
109	47	1/2	-88·717	48·6
106	48	(0)	-87·128	1·22
108	48	(0)	-89·248	0·88
110	48	0	-90·342	12·4
111	48	1/2	-89·246	12·8
112	48	0	-90·575	24·0
113	48	1/2	-89·041	12·3
114	48	0	-90·018	28·8
116	48	0	-88·712	7·6
113	49	9/2	-89·339	4·2
115	49	9/2	-89·542	95·8
112	50	(0)	-88·644	1·02
114	50	(0)	-90·565	0·69
115	50	1/2	-90·031	0·38
116	50	0	-91·523	14·3
117	50	1/2	-90·392	7·6
118	50	0	-91·652	24·1
119	50	1/2	-90·062	8·5
120	50	0	-91·100	32·5
122	50	(0)	-89·942	4·8
124	50	(0)	-88·237	6·1
121	51	5/2	-89·593	57
123	51	7/2	-89·224	43
120	52	(0)	-89·400	0·091
122	52	(0)	-90·291	2·5
123	52	1/2	-89·163	0·88
124	52	(0)	-90·500	4·6
125	52	1/2	-89·032	7·0
126	52	0	-90·053	18·7
128	52	0	-88·978	31·8
130	52	0	-87·337	34·4
127	53	5/2	-88·984	100
124	54	(0)	-87·450	0·094
126	54	(0)	-89·154	0·092
128	54	(0)	-89·850	1·92
129	54	1/2	-88·692	26·4
130	54	(0)	-89·880	4·1

A	Z	I	M-A	% rasprostr.
131	54	3/2	-88·411	21·2
132	54	0	-89·272	26·9
134	54	0	-88·120	10·4
136	54	0	-86·422	8·9
133	55	7/2	-88·160	100
130	56	(0)	-87·331	0·101
132	56	(0)	-88·380	0·097
134	56	0	-88.852	2·42
135	56	3/2	-87·980	6·6
136	56	0	-89·140	7·8
137	56	3/2	-88·020	11·3
138	56	0	-88·490	71·7
138	57	5	-86·710	0·089
139	57	7/2	-87·428	99·911
136	58	(0)	-86·550	0·19
138	58	(0)	-87·720	0·26
140	58	(0)	-88·125	88·47
142	58	(0)	-84·631	11·08
141	59	5/2	-86·072	100
142	60	(0)	-86·010	27·1
143	60	7/2	-84·039	12·2
144	60	(0)	-83·797	23·9
145	60	7/2	-81.469	8·3
146	60	(0)	-80·959	17·2
148	60	(0)	-77·435	5·7
150	60	(0)	-73·666	5·6
	61	nema stab. izotopa		
144	62	(0)	-81·980	3·1
147	62	7/2	-79·300	15·0
148	62	(0)	-79·371	11·2
149	62	7/2	-77·145	13·8
150	62	(0)	-77·056	7·4
152	62	(0)	-74·746	26·8
154	62	(0)	-72·393	22·7
151	63	5/2	-74·670	47·8
153	63	5/2	-73·361	52·2
152	64	(0)	-74·710	0·20

A	Z	I	M-A	% rasprostr.
154	64	(0)	-73·653	2·15
155	64	3/2	-72·037	14·7
156	64	(0)	-72·493	20·5
157	64	3/2	-70·769	15·7
158	64	(0)	-70·627	24·9
160	64	(0)	-67·781	21·9
159	65	3/2	-69·534	100
156	66	(0)	-70·860	0·052
158	66	(0)	-70·374	0·090
160	66	(0)	-69·673	2·29
161	66	5/2	-68·049	18·9
162	66	(0)	-68·182	25·5
163	66	5/2	-66·363	25·0
164	66	(0)	-65·949	28·2
165	67	7/2	-64·811	100
162	68	(0)	-66·370	0·136
164	68	(0)	-65·867	1·56
166	68	(0)	-64·918	33·4
167	68	7/2	-63·285	22·9
168	68	(0)	-62·983	27·1
170	68	(0)	-60·020	14·9
169	69	1/2	-61·249	100
168	70	(0)	-61·330	0·14
170	70	(0)	-60·530	3·03
171	70	1/2	-59·220	14·3
172	70	(0)	-59·280	21·8
173	70	5/2	-57·690	16·2
174	70	(0)	-57·060	31·8
176	70	(0)	-53·390	12·7
175	71	7/2	-55·290	97·40
176	71	7	-53·410	2·60
174	72	(0)	-55·550	0·18
176	72	(0)	-54·430	5·2
177	72	7/2	-52·720	18·5
178	72	0	-52·270	27·1
179	72	9/2	-50·270	13·8
180	72	0	-49·530	35·2

A	Z	I	M-A	% rasprostr.
180	73		-48·862	0·012
181	73	7/2	-48·430	99·988
180	74	(0)	-49·365	0·14
182	74	0	-48·156	26·2
183	74	1/2	-46·272	14·3
184	74	0	-45·619	30·7
186	74	0	-42·438	28·7
185	75	5/2	-43·725	37·1
187	75	5/2	-41·140	62·9
184	76	(0)	-44·010	0·018
186	76	(0)	-42·970	1·59
187	76	1/2	-41·141	1·64
188	76	(0)	-40·909	13·3
189	76	3/2	-38·840	16·1
190	76	(0)	-38·540	26·4
192	76	(0)	-35·910	41·0
191	77	3/2	-36·670	38·5
193	77	3/2	-34·454	61·5
192	78	(0)	-36·190	0·78
194	78	0	-34·721	32·8
195	78	1/2	-32·776	33·7
196	78	0	-32·633	25·4
198	78	(0)	-29·905	7·2
197	79	3/2	-31·166	100
196	80	(0)	-31·838	0·15
198	80	0	-30·966	10·0
199	80	1/2	-29·547	16·9
200	80	0	-29·503	23·1
201	80	3/2	-27·658	13·2
202	80	0	-27·346	29·8
204	80	0	-24·689	6·8
203	81	1/2	-25·753	29·5
205	81	1/2	-23·807	70·5
204	82	(0)	-25·109	1·3
206	82	0	-23·783	26
207	82	1/2	-22·446	21
208	82	0	-21·750	52
209	83	9/2	-18·262	100

DOBITNICI NOBELOVE NAGRADE ZA FIZIKU 1901–2003.

1901. **Vilhelm Conrad Rendgen** (Wilhelm Conrad Röntgen) za otkriće izvanrednih zraka koji su dobili ime po njemu.

1902. **Hendrik Anton Lorenc** (Hendrik Antoon Lorentz) i
Piter Zeman (Pieter Zeeman) za istraživanje uticaja magnetizma na radijacione pojave.

1903. **Antoan Henri Bekerel** (Antoine Henri Becquerel) za otkriće spontane radioaktivnosti
Pjer Kiri (Pierre Curie) i
Marija Sklodovska Kiri (Marie Sklodowska Curie) za istraživanje radijacionih pojava koje je pronašao profesor Henri Bekerel.

1904. **Lord Džon Vilijam Strut Rejli** (Lord John William Strutt Rayleigh) za istraživanje gustine najvažnijih gasova i za otkriće argona u vezi sa tim ispitivanjima.

1905. **Filip Eduard Anton Lenard** (Philipp Eduard Anton Lenard) za rad na katodnim zracima.

1906. **Ser Džosef Džon Tomson** (Sir Joseph John Thompson) za teorijska i eksperimentalna istraživanja provođenja elektriciteta kroz gasove.

1907. **Albert Abraham Majklson** (Albert Abraham Michelson) za izum preciznih optičkih instrumenata i spektroskopska i metrološka istraživanja izvedena pomoću njih.

1908. **Gabrijel Lipman** (Gabriel Lippmann) za metodu fotografskog reprodukovanja boja zasnovanu na pojavi interferencije.

1909. **Đulelmo Markoni** (Guglielmo Marconi) i
Karl Ferdinand Braun (Carl Ferdinand Braun) za doprinose razvoju bežične telegrafije.

1910. **Johanes Diderik Van Der Vals** (Johannes Diderik Van Der Waals) za rad na jednačini stanja za gasove i tečnosti.

1911. **Vilhelm Vin** (Wilhelm Wien) za otkrića u vezi sa zakonima zračenja toplote.

1912. **Nils Gustaf Dalen** (Nils Gustaf Dalén) za pronalazak automatskih regulatora u vezi sa gasnim akumulatorima za osvetljavanje svetionika.

1913. **Heike Kamerling-Ons** (Heike Kamerlingh-Onnes) za ispitivanje osobina materije na niskim temperaturama što je, *inter alia,* omogućilo dobijanje tečnog helijuma.

1914. **Maks fon Laue** (Max von Laue) za otkriće difrakcije *x*-zraka na kristalima.

1915. **Ser Vilijem Henri Brag** (Sir William Henry Bragg) i
Ser Vilijem Lorens Brag (Sir William Lawrence Bragg) za analizu kristalne strukture pomoću *x*-zraka.

1916. Nagrada nije dodeljena.

1917. **Čarles Glover Barkla** (Charles Glover Barkla) za otkriće karakterističnog rendgenskog zračenja elemenata.

1918. **Maks Karl Ernst Ludwig Plank** (Max Karl Ernst Ludwig Planck) za otkriće energijskih kvanta.

1919. **Johanes Štark** (Johannes Stark) za otkriće Doplerovog efekta u kanalskim zracima i cepanja spektralnih linija u električnom polju.

1920. **Čarls Eduard Galam** (Charles Edouard Guillaume) za doprinos preciznim merenjima u fizici otkrićem anomalija u čeličnim legurama nikla.

1921. **Albert Ajnštajn** (Albert Einstein) za zasluge u teorijskoj fizici a posebno za otkriće zakona fotoelektričnog efekta.

1922. **Nils Bor** (Niels Bohr) za ispitivanje strukture atoma i zračenja koje iz njih izvire.

1923. **Robert Endrjus Milikan** (Robert Andrews Millikan) za rad na elementarnom naelektrisanju i fotoelektričnom efektu.

1924. **Karl Man Georg Zigban** (Karl Manne Georg Siegbahn) za otkrića i istraživanja u polju spektroskopije *x*-zraka.

1925. **Džejms Frank** (James Franck) i
Gustav Herc (Gustav Hertz) za pronalazak zakonitosti pri sudaru elektrona i atoma.

1926. **Žan Baptist Peren** (Jean Baptiste Perrin) za rad na diskontinuiranoj strukturi materije, a naročito za otkriće sedimentacione ravnoteže.

1927. **Artur Holi Kompton** (Arthur Holly Compton) za pronalazak efekta koji nosi njegovo ime.
Čarls Tomson Ris Vilson (Charles Thomson Rees Wilson) za otkriće metode koja čini vidljivim putanje naelektrisanih čestica kondenzovanjem pare.

1928. **Ser Oven Vilans Ričardson** (Sir Owen Willans Richardson) za rad na termojonskim pojavama a posebno za pronalazak po njemu nazvane zakonitosti.

1929. **Princ Luj-Victor de Brolji** (Prince Louis-Victor de Broglie) za otkriće talasne prirode elektrona.

1930. **Ser Čandrasekara Venkata Raman** (Sir Chandrasekhara Venkata Raman) za rad na rasejanju svetlosti i za otkriće efekta koji je po njemu dobio ime.

1931. Nagrada nije dodeljena.

1932. **Verner Hajzenberg** (Werner Heisenberg) za stvaranje kvantne mehanike čija je primena, *inter alia,* dovela do otkrića alotropskih oblika vodonika.

1933. **Ervin Šredinger** (Erwin Schrödinger) i
Pol Adrien Moris Dirak (Paul Adrien Maurice Dirac) za otkriće novih produktivnih oblika atomske teorije.

1934. Nagrada nije dodeljena.

1935. **Ser Džejms Čedvik** (Sir James Chadwick) za otkriće neutrona.

1936. **Viktor Franc Hes** (Victor Franz Hess) za otkriće kosmičkih zraka i
Karl David Anderson (Carl David Anderson) za otkriće pozitrona.

1937. **Klinton Džozef Dejvison** (Clinton Joseph Davisson) i
Ser Džordž Padžet Tomson (Sir George Paget Thomson) za eksperimentalni pronalazak difrakcije elektrona na kristalima.

1938. **Enriko Fermi** (Enrico Fermi) za demonstraciju postojanja novih radioaktivnih elemenata stvorenih neutronskim ozračivanjem i za pronalazak nuklearnih reakcija izazvanih sporim neutronima.

1939. **Ernest Orlando Lorens** (Ernest Orlando Lawrence) za pronalazak i razvoj ciklotrona i za rezultate postignute njime, posebno u vezi sa veštačkim radioaktivnim elementima.

1940–1942. Nagrada nije dodeljena.

1943. **Oto Štern** (Otto Stern) za doprinos razvoju metode molekulskih snopova i otkriće magnetnog momenta protona.

1944. **Isidor Ajsak Rabi** (Isidor Isaac Rabi) za rezonantnu metodu snimanja magnetnih osobina atomskog jezgra.

1945. **Volfgang Pauli** (Wolfgang Pauli) za otkriće principa isključenja poznatog kao Paulijev princip.

1946. **Persi Vilijams Bridžman** (Percy Williams Bridgman) za pronalazak aparature za stvaranje ekstremno visokih pritisaka i za otkrića postignuta njome u polju fizike visokih pritisaka.

1947. **Sir Edvard Viktor Eplton** (Sir Edward Victor Appleton) za istraživanja fizike gornjih slojeva atmosfere a posebno za pronalazak takozvanog Epltonovog sloja.

1948. **Lord Patrik Majnard Stjuart Bleket** (Lord Patrick Maynard Stuart Blackett) za razvoj metode Vilsonove komore i otkrića učinjenih njome u polju nuklearne fizike i kosmičkih zraka.

1949. **Hideki Jukava** (Hideki Yukawa) za predviđanje postojanja mezona na osnovu teorijskog rada na nuklearnim silama.

1950. **Sesil Frank Pauel** (Cecil Frank Powell) za razvoj fotografske metode za ispitivanje nuklearnih procesa i otkrića u vezi sa mezonima učinjena tom metodom.

1951. **Ser Džon Daglas Kokroft** (Sir John Douglas Cockcroft) i
Ernest Tomas Sinton Valton (Ernest Thomas Sinton Walton) za pionirski rad na transmutaciji atomskih jezgara pomoću vaštački ubrzanih atomskih čestica.

1952. **Feliks Bloh** (Felix Bloch) i
Edvard Mils Parsel (Edward Mills Purcell) za razvoj novih metoda za precizna merenja nuklearnih magnetnih momenata i otkrića u vezi sa njima.

1953. **Fric (Frederik) Zernike** [Frits (Frederik) Zernike] za demonstraciju metode faznog kontrasta, a naročito za pronalazak fazno kontrastnog mikroskopa.

1954. **Maks Born** (Max Born) za fundamentalna istraživanja u kvantnoj mehanici a naročito za statističko tumačenje talasne funkcije i
Valter Bote (Walther Bothe) za koincidentnu metodu i otkrića učinjena pomoću nje.

1955. **Vilis Judžen Lamb** (Willis Eugene Lamb) za otkrića u vezi sa finom strukturom spektra vodonikovog atoma i
Polikarp Kuš (Polykarp Kusch) za precizno određivanje magnetnog momenta elektrona.

1956. **Vilijam Šokli** (William Shockley),
Džon Bardin (John Bardeen) i
Valter Hauzer Britn (Walter Houser Brattain) za proučavanje poluprovodnika i otkriće tranzistorskog efekta.

1957. **Čen Ning Jang** (Chen Ning Yang) i
Cung-dao Li (Tsung-dao Lee) za prodorno istraživanje takozvanih zakona parnosti koji su doveli do važnih otkrića u vezi s elementarnim česticama.

1958. **Pavel Aleksejevič Čerenkov** (Павел Алексеевич Черенков),
Ilja Mihailovič Frank (Илья Михайлович Франк) i
Igor Jevgenijevič Tam (Игор Евгнйевич Там) za otkriće i objašnjenje Čerenkovljevog efekta.

1959. **Emilio Đino Segre** (Emilio Gino Segré) i
Oven Čemberlejn (Owen Chamberlain) za otkriće antiprotona.

1960. **Donald A. Glejzer** (Donald A. Glaser) za pronalazak mehuraste komore.

1961. **Robert Hofštater** (Robert Hofstadter) za pionirska istraživanja rasejanja elektrona na atomskim jezgrima i time omogućeno otkriće strukture nukleona i
Rudolf Ludvig Mesbauer (Rudolf Ludwig Mössbauer) za istraživanja u vezi sa rezonantnom apsorpcijom gama-zračenja i, s tim u vezi, pronalaska efekta koji nosi njegovo ime.

1962. **Lav Davidovič Landau** (Лев Давидович Ландау) za pionirske teorije kondenzovane materije, posebno tečnog helijuma.

1963. **Judžin P. Vigner** (Eugene P. Wigner) za doprinos teoriji atomskog jezgra i elementarnih čestica, posebno kroz pronalazak i primenu osnovnih principa simetrije,
Marija Gepert-Majer (Maria Goeppert-Mayer) i
J. Hans D. Jensen za pronalaske u vezi sa strukturom jezgra i modela nuklearne ljuske.

1964. **Čarls H. Tauns** (Charles H. Townes),
Nikolaj Genadijevič Basov (Николай Генадиевич Басов) i
Aleksandar Mihailovič Prohorov (Александр Михайлович Прохоров) za fundamentalni rad u polju kvantne elektronike, koji je doveo do konstrukcije oscilatora i pojačivača zasnovanih na masersko-laserskim principima.

1965. **Sin-Itiro Tomonaga** (Sin-Itiro Tomonaga),
Džulijan Švinger (Julian Schwinger) i
Ričard P. Fejnman (Richard P. Feynman) za fundamentalni rad u kvantnoj elektrodinamici, sa posledicama od velikog značaja za fiziku elementarnih čestica.

1966. **Alfred Kastler** (Alfreed Kastler) za pronalazak i razvoj optičkih metoda za ispitivanje hercijanskih rezonancija u atomima.

1967. **Hans Albreht Bete** (Hans Albrecht Bethe) za doprinos teoriji nuklearnih reakcija, a posebno za njegova otkrića u vezi sa proizvodnjom energije u zvezdama.

1968. **Luis V. Alvarez** (Luis W. Alvarez) za odlučujući doprinos fizici elementarnih čestica a posebno za otkriće velikog broja rezonantnih stanja, za razvoj tehnike vodonične mehuraste komore i analize podataka čime su omogućena pomenuta otkrića.

1969. **Mjurej Gelman** (Murray Gell-Mann) za doprinos i pronalaske u vezi sa klasifikacijom elementarnih čestica i njihovih interakcija.

1970. **Hans Alfen** (Hannes Alfvén) za fundamentalne radove i pronalaske u magneto-hidrodinamici sa plodnim primenama u različitim granama fizike plazme i
Luis Nil (Louis Néel) za fundamentalne radove i pronalaske u vezi s antiferomagnetizmom i ferimagnetizmom koji su doveli do važnih primena u fizici čvrstog stanja.

1971. **Denis Gabor** (Dennis Gabor) za pronalazak i razvoj holografske metode.

1972. **Džon Bardin** (John Bardeen),
Leon N. Kuper (Leon N. Cooper) i
Dž. Robert Štrajfer (J. Robert Schrieffer) za zajednički razvoj teorije superprovodljivosti obično nazivane BKS (BCS) teorijom.

1973. **Leo Esaki** (Leo Esaki),
Ajvar Gjaver (Ivar Giaever) za eksperimentalna otkrića u vezi sa tunelskim pojavama u poluprovodnicima i superprovodnicima i
Brajan D. Džosefson (Brian D. Josephson) za teorijsko pretskazanje osobina superstruje kroz tunelsku barijeru, a posebno pojava koje su opštepoznate kao Džosefsonov efekt.

1974. **Ser Martin Rajl** (Sir Martin Ryle),
Antoni Hjuiš (Antony Hewish) za pionirska istraživanja u radio-astrofizici: Rajl za osmatranja i pronalaske, posebno tehnike aperturne sinteze i Hjuiš za odlučujuću ulogu u otkriću pulsara.

1975. **Age Bor** (Aage Bohr),
Ben Motelson (Ben Mottelson) i
Džejms Reinvoter (James Rainwater) za otkriće veze između kolektivnog kretanja i kretanja čestica u atomskom jezgru i za razvoj teorije strukture atomskog jezgra zasnovane na toj vezi.

1076. **Barton Rihter** (Burton Richter) i
Semjuel K. K. Ting (Samuel C. C. Ting) za pionirski rad u pronalaženju teških elementarnih čestica nove vrste.

1977. **Filip V. Anderson** (Philip W. Anderson),
ser Nevil F. Mot (Sir Nevill F. Mott) i
Džon H. van Vlek (John H. Van Vleck) za fundamentalno teorijsko istraživanje elektronske strukture magnetskih i neuređenih sistema.

1978. **Pjotr Leonidovič Kapica** (Пйотр Леонидович Капица) za osnovne pronalaske i otkrića u oblasti fizike niskih temperatura,
Arno A. Pencias (Arno A. Penzias) i
Robert V. Vilson (Robert W. Wilson) za otkriće kosmičkog mikrotalasnog pozadinskog zračenja.

1979. **Šeldon L. Glašov** (Sheldon L. Glashow),
Abdus Salam (Abdus Salam) i
Stiven Vajnberg (Steven Weinberg) za doprinos teoriji sjedinjene slabe i elektromagnetske interakcije između elementarnih čestica, uključujući *inter alia* pretpostavku o slabim neutralnim strujama.

1980. **Džejms V. Kronin** (James W. Cronin) i **Val L. Fič** (Val L. Fitch) za otkriće narušenja osnovnog principa simetrije pri raspadu neutralnog K mezona.

1981. **Nikolas Bloembergen** (Nicolaas Bloembergen),
Artur L. Šavlov (Arthur L. Schawlow) za doprinos razvoju laserske spektroskopije i
Kaj M. Zigban (Kai M. Siegbahn) za doprinos razvoju elektronske spektroskopije visokog razlaganja.

1982. **Kenet Dž. Vilson** (Kenneth G. Wilson) za teoriju kritičnih pojava u vezi sa faznim prelazima.

1983. **Subramanijan Čandrašekar** (Subramanyan Chandrasekhar) za teorijsko proučavanje fizičkih procesa značajnih za strukturu i evoluciju zvezda i
Vilijam A. Fauler (William A. Fowler) za teorijska i eksperimentalna ispitivanja nuklearnih reakcija značajnih za stvaranje hemijskih elemenata u svemiru.

1984. **Karlo Rubija** (Carlo Rubbia) i
Simon Van der Mer (Simon Van Der Meer) za odlučujući doprinos velikom projektu koji je doveo do otkrića W i Z čestica polja, prenosilaca slabe interakcije.

1985. **Klaus fon Klicing** (Klaus von Klitzing) za otkriće kvantnog Holovog efekta.

1986. **Ernst Ruska** (Ernst Ruska) za fundamentalni doprinos elektronskoj optici i za konstrukciju prvog elektronskog mikroskopa,
Gerd Binig (Gerd Binnig) i
Hajnrih Rorer (Heinrich Rohrer) za konstrukciju skenirajućeg tunelskog mikroskopa.

1987. **J. Georg Bednorz** (J. Georg Bednorz) i
K. Aleksander Miler (K. Alexander Müller) za važan prodor u otkriću superprovodljivosti u keramičkim materijalima.

1988. **Leon M. Lederman** (Leone Ledermann),
Melvin Švarc (Melvin Schwartz) i
Džek Štajnberger (Jack Steinberger) za metodu neutrinskog snopa i potvrdu dubletne strukture leptona preko otkrića mionskog neutrina.

1989. **Norman F. Remzi** (Norman F. Ramsey) za pronalazak metode razdvojenih oscilatornih polja i njenu primenu u vodoničnom maseru i ostalim atomskim časovnicima,
Hans G. Demelt (Hans G. Dehmelt) i
Volfgang Paul (Wolfgang Paul) za razvoj tehnike jonske klopke.

1990. **Džerom I. Fridman** (Jerome I. Friedman),
Henri V. Kendal (Henry W. Kendall) i
Ričard E. Tejlor (Richard E. Taylor) za pionirska istraživanja dubokog neelastičnog rasejanja elektrona na protonima i vezanim neutronima, koja su veoma značajna za razvoj modela kvarka u fizici elementarnih čestica.

1991. **Pjer-Žil De Genes** (Pierre-Gilles De Gennes) za otkriće da metode razvijene za ispitivanje uređenosti u jednostavnim sistemima mogu biti uopštene na složenije forme materije, posebno na tečne kristale i polimere.

1992. **Džordžis Čarpak** (Georges Charpak) za pronalazak i razvoj detektora čestica a posebno proporcionalnih komora sa više vlakana (multiwire proportional chamber).

1993. **Rasel A. Huls** (Russell A. Hulse) i
Džozef H. Tejlor mlađi (Joseph H. Taylor jr.) za otkriće nove vrste pulsara (otkriće koje je otvorilo nove mogućnosti za ispitivanje gravitacije).

1994. **Bertram N. Brokhauz** (Bertram N. Brockhouse) za razvoj neutronske spektroskopije i
Kliford G. Šul (Clifford G. Shull) za razvoj tehnike neutronske difrakcije (pionirski doprinos razvoju tehnike rasejanja neutrona za ispitivanje kondenzovane materije).

1995. **Martin L. Perl** (Martin L. Perl) za otkriće tau leptona i
Frederik Reins (Frederick Reines) za detekciju tau neutrina (poinirski eksperimentalni doprinos fizici leptona).

1996. **Dejvid M. Li** (David M. Lee),
Daglas D. Ošerof (Douglas D. Osheroff) i
Robert C. Ričardson (Robert C. Richardson) za otkriće superfluidnosti u helijumu-3.

1997. **Stiven Ču** (Steven Chu), **Klod Koen-Tanudji** (Claude Cohen-Tannoudji) i
Vilijam D. Filips (William D. Phillips) za razvoj metode za hlađenje i hvatanje atoma laserskim zracima.

1998. **Robert B. Laflin** (Robert B. Laughlin),
Horst L. Štermer (Horst L. Störmer) i
Danijel K. Cui (Daniel C. Tsui) za otkriće nove forme kvantne tečnosti s ekscitacijama frakcionim naelektrisanjima.

1999. **Žerardus Hooft** (Gerardus't Hooft) i
Martinus J. G. Veltman (Martinus J. G. Veltman) za proučavanja kvantne strukture elektroslabe interakcije u fizici.

2000. **Zores I. Alferov** (Zhores I. Alferov), **Herman Kremer** (Herbert Kröemer), za razvoj poluprovodnih heterostruktura korišćenih za brzu i opto-elektroniku i
Džek Kilbi (Jack S. Kilby) za doprinos pronalasku integrisanih kola.

2001. **Eric A. Kornel** (Erik A. Cornell),
Wolfgang Keterle (Wolfgang Ketterle),
Karl E. Viman (Carl E. Wieman) za ostvarivanje Boze-Ajnštajnove kondenzacije u razređenim gasovima alkalnih metala, i za prva fundamentalna ispitivanja osobina kondenzata.

2002. **Rejmond Dejvis mlađi** (Raymond Davis Jr.),
Masatoši Košiba (Masatoshi Koshiba), za pionirski doprinos astrofizici, posebno za detektovanje kosmičkih neutrina i
Rikardo Đakoni (Riccardo Giacconi), za pionirski doprinos astrofizici, koji je doprineo otkriću kosmičkih izvora *x*-zraka.

2003. **Aleksej A. Abrikosov** (Алексей А. Абрикосов),
Vitalij L. Ginzburg (Виталй Л. Гинзбургь) и
Antoni L. Ledžet (Anthony J. Leggett), za pionirski doprinos teoriji superprovodnika i superfluida.

LITERATURA

1. Acosta, V., Cowan C. and Graham, B., *Essentials of Modern Physics,* Harper & Row Publishers, New York, 1981.

2. Anderson, E., *Modern Physics and Quantum Mechanics,* Philadelphia, W. B. Saunders Company, 1971.

3. Atkins, P. W., *Molecular Quantum Mechanics,* second edition, Oxford University Press, Oxford, New York, 1983.

4. Atkins, P. W., *Physical Chemistry,* fourth and fifth edition, Oxford University Press, Oxford, Melbourne, Tokyo, 1990, 1994.

5. Борн, Макс, *Аīомная физика,* превод с английского Завялова О. И. и Павлова, В. П., Мир, Москва, 1970.

6. Beiser, A., *Concepts of Modern Physics,* fifth edition, McGraw-Hill Text, 1995.

7. Blakemore, J. S., *Solid State Physics,* second edition, Cambridge University Press, 1985.

8. Burcham, W. E., *Nuklearna fizika (uvod) sa fizikom čestica,* Naučna knjiga, Beograd, 1974.

9. Compton, H. A., *The Quantum Theory of Scattering of x-rays by light Elements,* "Physical Review", 21, 1923, p. 483.

10. Compton, H. A., *The Spectrum of Scattered x-rays,* "Physical Review", 22, 1923, p. 409.

11. Cohen-Tannoudji, C., *Atoms in Electromagnetic Fields,* World Scientific, River Edge, New York, 1994.

12. Condon, E. U. & Shortley, G. H., *The Theory of Atomic Spectra,* Cambridge University Press, Cambridge, 1970.

13. Cvitaš, T., Kallay, N., *Fizičke veličine i jedinice međunarodnog sustava,* Školska knjiga, Zagreb, 1985.

14. Demtröder, W., *Experimental physik,* 3,4, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1996.

15. Davisson, C. and Germer, L. H., *Diffraction of electrons by a crystal of nickel,* "Physical Review", 30, 1927, p. 705.

16. Dirac, P. Am. M., *The Principiles of Quantum Mechanics,* Clarendon Press, Oxford, 1970.

17. Eisberg, R., Resnick, R., Caldwell, D.O. and Christman, J. R., *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles,* second edition, Wiley, New York, 1985.

18. Erkoc, S. and Uzer, T., *Lecture Notes on Atomic and Molecular Physics: Atomic and Molecular Physics,* World Scientific, Singapore; River Edge, New York, 1996.

19. Ezhela, V. V., Filimonov, B. B., Lugovsky, S. B., Polishchuk, B. V., Striganov, S. I., Armstrong, B., Barnett, R. M., Groom, D. E., Gee, P. S., Tripple, T. G., Wohl, C. G., and Jackson, J. D., *Particle Physics: One Hundred Years of Discoveries: An Annotated Chronological Bibliography,* American Institute of Physics, Woodbury, New York, 1996.

20. Feynman, R., *Osobitosti fizikalnih zakona,* Školska knjiga, Zagreb, 1977.

21. Feynman, R., Leiton, R., Sends, M., *The Feynman lectures on Physics,* I, II and III, Addison Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, Menio Park, California·London·Amsterdam·Don Mills, Ontario·Sydney.

22. Finkelnburg, W., *Einführung in die Atomphysik,* eleventh and twelfth edition, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1967.

23. French, A. P. and Taylor, E. F., *An Introduction to Quantum Physics,* Norton, New York, 1978.

24. Friedlander, G. and Kennedy, J. W., *Nuklearna i radiohemija,* Naučna knjiga, Beograd, 1962.

25. Gautreau, R. and Savin, W., *Theory and Problems of Modern Physics,* McGraw-Hill, New York, 1978.

26. Gribbin, J. R., *Q is for Quantum: An Encyclopedia of Particle Physics,* The Free Press, New York, 1998.

27. Haken, H. and Wolf, H. C., *The Physics of Atoms and Quanta: Introduction to Experiments and Theory,* fifth edition, Springer, New York, 1996.

28. Heisenberg, W., *Fizika i metafizika,* Nolit, Beograd, 1989.

29. Herbut, F., *Kvantna mehanika za istraživače,* Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Beogradu i Jugoslovenski zavod za produktivnost rada i informacione sisteme, Beograd, 1984.

30. Herzberg, G., *Atomic Spectra and Atomic Structure,* second edition, Dover, New York, 1944.

31. Иродов, И. Е., *Сборник задач по Аτомной и Ядерной физике,* Атомиздат, Москва, 1971.

32. Jurić, M., *Atomska fizika,* treće izdanje, Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Beogradu i Jugoslovenski zavod za produktivnost rada i informacione sisteme, Beograd, 1986.

33. Kane, G. L., *The Particle Garden: Our Universe as Understood by Particle Physicists,* Addison-Wesley, Reading, Mass., 1995.

34. Kittel, C., *Uvod u fiziku čvrstog stanja,* Savremena administracija, Beograd, 1970.

35. Kittel, C., Knight, D. W. and Ruderman, A. M., *Mehanika* – udžbenik fizike Sveučilišta u Berkliju, Tehnička knjiga, Zagreb, 1982.

36. Krane, K., *Modern Physics,* second edition, Wiley, New York, 1995.

37. Landau, L. D. i Lifšic, E. M., *Kvantna mehanika,* Građevinska knjiga, Beograd, 1966.

38. Marić, S., *Na izvorima fizike,* Kulturni centar, Novi Sad, 1971.

39. Мелвин, Хьыз, Е. А., *Физическая Химмия,* I и II, Издательство иностранной литературы, Москва, 1962.

40. Milikan, R. A., *A direct Photoelectric Determination of Plank'sh,* „Physical Review", VII, 1916, p. 355.

41. Mušicki, Đ., *Uvod u teorijsku fiziku,* I i II, Zavod za izdavanje udžbenika SR Srbije, Beograd, 1964.

42. Niels, B., *Atomska fizika i ljudsko znanje,* Nolit, Beograd, 1985.

43. Njegovan, V. N., *Osnovi hemije,* Naučna knjiga, Beograd, 1965.

44. Ohanian, H., *Modern Physics,* Engelwood Cliffs, Prentice Hall Inc., 1987.

45. Pauling, L. and Wilson, E. B., *Introduction to Quantum Mechanics,* McGraw-Hill Book Company, New York and London, 1935.

46. Perić, M., Radić – Perić, J., *Praktikum i zadaci iz atomistike,* Izdavačko informativni centar studenata, Beograd, 1976.

47. Pilar, L. F., *Elementary Quantum Chemistry,* McGraw-Hill, New York, 1968.

48. Purcell, M. E., *Elektricitet i magnetizam* – udžbenik fizike Sveučilišta u Berkliju, Tehnička knjiga, Zagreb, 1982.

49. Reid, J., *The Atomic Nukleus,* Manchester University Press, Manchester, 1984.

50. Resnick, R., Halliday, D., and Krane, K. S., *Physics,* fourth edition, Wiley, New York, 1992.

51. Rohlf, J. W., *Modern Physics from A to Z,* John Wiley & Sons, New York, 1994.

52. Sandin, T., *Essentials of Modern Physics,* Addison Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1989.

53. Schrödinger, E., *Die Wellenmechanic,* Erns Batenberg, Verlag, Stuttgart, 1963.
54. Serway, R. A., Moses, C. J. and Moyer, C. A., *Modern Physics,* second Bk&Dk edition, Hbj School, 1997.
55. Shiff, I. L., *Quantum Mechanics,* third edition, McGraw-Hill, Kögasusha, New York, 1968.
56. Stanić, V. B., Marković, I. M., *Zbirka rešenih zadataka iz atomske fizike,* Naučna knjiga, Beograd, 1973.
57. Supek, I., *Teorijska fizika i struktura materije,* I i II deo, treće izdanje, Školska knjiga, Zagreb, 1964.
58. Широков, Ю. М., Юдин, Н. П., *Ядерная физика,* Наука, Москва, 1980.
59. Špoljskij, E. V., *Atomska fizika,* Zavod za izdavanje udžbenika SR Srbije, Beograd, 1963.
60. Шпольский, Э. В., *Атомная физика,* Наука, Москва, 1984.
61. Vukanović, V., *Atomistika,* Naučna knjiga, Beograd, 1977.
62. Weber, H., *Laser-Grundlagen und Anwendungen,* Physik Verlag GmbH, Weinheim, 1972.
63. Wichmann, H. E., *Kvantna fizika* – udžbenik fizike Sveučilišta u Berkliju, Tehnička knjiga, Zagreb, 1982.

INDEKS POJMOVA

A

Ajnštajnova teorija fotoefekta 244
α-čestice
– emisija iz jezgra (tunel efekt) 516
– energija 514
– rasejanje 477
– spektar energije 515
α-raspad 514
Akceleratori 498, 554
Aktinoidi 451
Aktivnost 511, 513
Alkalni atomi 102, 450
Alkalni metali
– efektivno naelektrisanje 138, 140
– energija elektrona 138
– konstanta zaklanjanja 138
– spektri atoma 136
Amper-Laplasova jednačina 165
Anihilacija 541
Anoda (antikatoda) 98
Antičestice 531, 541, 561
Antineutrino 533
Antineutron 530
Antiproton 531
Antisimetrična talasna funkcija 437
Apsorpcija
– Ajnštajnov koeficijent za apsorpciju 460
– γ -fotona 547
– rezonantna 547
Argon 450
Arhimedov zakon 12
Atom
– Borov model 89
– Bor-Zomerfeldova teorija 110
– energijski nivoi 125
– pobuđivanje sudarima 98
– Raderfordov model 473, 478, 490
– vektorski model 172
Atom antivodonika 562
Atom elektriciteta 31
Atom helijuma
– osnovno stanje 432
– primena varijacione metode 434
– talasne funkcije 437
Atomi sa više elektrona
– Hamiltonov operator 427, 430
– Šredingerova jednačina 427
– talasna funkcija 430
Atom i zračenje energije 454
Atomska jedinica mase 581
Atomske orbitale
– d orbitale 420
– p orbitale 412
– s orbitale 411
Atomsko jezgro
– gustina naelektrisanja 497
– modeli 505
– osobine 497
– radijus 502
– sastav 498
– sile 497, 504
Atom vodonika
– elektronska konfiguracija 449

– energija 85, 90
– izotopi 103
– magnetni moment 149
– moment impulsa 91
– poreklo spektralnih serija 88
– spektar 85
Atom vodonikovog tipa
– energijski nivoi 102, 105, 124, 127
– Šredingerova jednačina 391
Avogadrov broj
– određivanje 17
Azot (N) 449

B

Barioni 560, 564, 567
Balmerova serija 85
Berilijum (Be)
– elektronska konfiguracija 269, 449
β (beta) raspad
– elektronski β^- 524
– energija raspada 526
– kod izobara 526
– pozitronski β^+ 526
– spektar energije elektrona 526
Bio-Savarov zakon 165
Bolcmanova konstanta 26, 73, 76
Bolcmanova raspodela 232
Bor (B) 449
Bornova interpretacija talasne funkcije 347
Borov magneton 152
Borov model atoma
– energija 89, 92
– postulati 91
– princip korespondencije 107
– radijusi 92
– Ridbergova konstanta 92
Borov radijus 92
Bor-Zomerfeldova teorija
– elektronske orbite 110, 123
– energija atoma 125, 126
– spektri alkalnih atoma 136
– kvantni uslovi 123, 127, 131
– relativistička korekcija 126
Boze-Ajnštajnova statistika 236
Bozoni 236
Bozoni polja 554
Braunovo kretanje
– Ajnštajnova jednačina 16, 23
Breketova serija 87

C

Cepanje nivoa
– dubletno cepanje 145
– u magnetnom polju 215
Cepanje snopa atoma srebra 29
Cepanje snopa litijumovih atoma 213
Cepanje spektralnih linija
– u magnetnom polju 215
Cer (Ce)
– elektronska konfiguracija 451
Cink (Zn)
– elektronska konfiguracija 450
Crno telo
– klasični zakoni zračenja 61, 68
– Plankov zakon 75
– zračenje 66, 68

D

Debaj-Šererov metod difrakcije
difrakcije *x*-zračenja 257
De Broljijeva jednačina 277
De Broljijev talas 290
Defekt mase 501
Degeneracija
– uklanjanje po m_j u magnetnom polju 201
– uklanjanje po m_l u magnetnom polju 198
– uklanjanje po m_s u magnetnom polju 200
– uklanjanje po n_φ 126, 131
Degenerisana stanja 118
Delta-funkcija 296
Deuterijum 97, 102, 103, 499
Devison-Dermerov ogled 279
Difrakcija
– elektrona 250, 278, 330
– molekula fulerena 286, 288
– *x*-zračenja na kristalima 250
Difuzija 14, 17, 20
Dipol
– energija zračenja 462
Dipolni moment 158

Dipolni moment prelaza 462
Dirakova jednačina 542
Disperzija 313, 342, 351, 454
Doplerov efekt 328, 546
Dubletna struktura 144, 173, 194, 437

E

Efektivno naelektrisanje 138
Efikasni presek 384, 482, 484 534
Električni dipol 158, 208, 215, 539
Elektromagnetna sila (Kulonova sila) 556
Elektron
– jedinica naelektrisanja 31
– masa 35
– specifično naelektrisanje 54, 56, 151, 155
– spin 126, 143, 149, 155
– u električnom polju 36, 51, 55, 57
– u magnetnom polju 36, 54, 55, 57
Elektronska konfiguracija 448
Elektronske orbite
– alkalnih atoma 139
– eliptične 125
– kružne 91, 139
– orijentacija u prostoru 129
– promenljive 126
Elektronvolt 46
Elektrostatička sila 31
Elementarne čestice 553
Elementarno naelektrisanje 448
Energija helijumovog atoma 435
Energija jonizacije 101
Energija magnetnih momenata u magnetnom polju
– orbitnog magnetnog momenta 160, 198
– spinskog magnetnog momenta 163, 200
– ukupnog magnetnog momenta 201
Energija, negativna 544
Energija pobuđivanja 100
Energija spin-orbitne interakcije 165, 191
Energija vezivanja
– elektrona 104
– jezgra 502, 506
Energija višeelektronskih atoma 444, 445, 447
Energija vodonikovog atoma
– iz Borovog modela 91, 92, 97
– iz Bor-Zomerfeldove teorije 117, 125
– prema Šredingerovoj jednačini 391, 407
Energijski nivoi
– atoma kalijuma 146
– atoma vodonika 88, 127, 133
– atoma vodonika i njemu sličnih jona 105
– atoma vodonika prema Borovom i Bor-Zomerfeldovom modelu i prema Dirakovoj teoriji 127
– litijuma i litijumu sličnih jona 142, 143

F

Faulerova serija 107
Fermi-Dirakova statistika 240
Fermijeva funkcija 241
Fermijev nivo 241
Fermioni 240, 438, 507
Fina struktura
– atoma kalijuma 143
– spektra alkalnih atoma 143
Fluorescencija 511
Fokov operator 446
f-orbitale 140
Fosforescencija 511
Fotoelektrični efekt
– Ajnštajnova relacija 231, 244
Foton
– impuls 91, 98, 218, 231, 236, 267, 269
– spin 236
Fotostruja 243, 246
Frank-Hercovi ogledi
– energija jonizacije atoma 101
– energija pobuđivanja atoma 98
Funkcija gustine verovatnoće 352, 420
Furijeova transformacija 303
Furijeovi redovi 298

G

Gajger-Marsdenov eksperiment 473, 477
Gajger-Natalovo pravilo 516
γ-zračenje
– nastajanje parova 541
– rezonantna apsorpcija 535
– unutrašnja konverzija 540
Gravitaciona sila 555

H

Hadroni 553
Hajzenbergove relacije neodređenosti 318
Hartri-Fokove jednačine 444
Hercov dipol 215

I

Inertni elementi (atomi) 448
Integral izmene 442
Izlazni rad 244
Izobari
– Matauhova pravila 526
Izotopi
– helijuma 498
– neona 498
– vodonika 103

J

Jaka (nuklearna) sila 504, 557
Jednačina De Broljijevih talasa 290
Jednačina ravnog talasa 61
Jednoelektronski joni
– energijski nivoi 104, 105
– spektralne serije 107
Jednoelektronski operator 444
Jezgro atoma → atomsko jezgro
Jonizacioni potencijali (energije) 102

K

Kalcijum
– elektronska konfiguracija 450
Kiseonik (O)
– elektronska konfiguracija 449
K-nivo 262
Komptonov efekt 267
Konstanta fine strukture 125
Konstanta radioaktivnog raspada 513
Konstanta spin orbitne sprege 169
Koordinate
– prostorne 437
– spinske 437
Korpuskularno-talasni dualizam 277
Kripton (Kr)
– elektronska konfiguracija 450
Ksenon (Xe)
– elektronska konfiguracija 450
Kulonova sila 91
Kulonov integral 442
Kulonov potencijal 396
Kvant
– dejstva 57
– elektronskog paramagnetizma (Borov magneton) 152
– energije 76
Kvantni brojevi
– azimutni i radijalni 124
– glavni (Borov model) 92
– magnetni 129
– orbitni 144
– spinski 144
– unutrašnji 144
Kvarkovi 565
K-zahvat 531

L

Lagerovi polinomi
– pridruženi 409
Lajmanova serija 87, 106
Landeov g-faktor 154
Lantan
– elektronska konfiguracija 451
Lantanoidi 451
Laplasov operator 338
Larmorova frekvencija
– orbitnog ugaonog (magnetnog) momenta 161, 198
– spinskog magnetnog momenta 163, 200
– ukupnog (ugaonog) magnetnog momenta 201
Laueov metod difrakcije *x*-zračenja 250
Leptoni
– leptonski broj 559, 563

Ležanrovi polinomi 403
Litijumov atom
– dijagram energijskih nivoa 142
– elektronska konfiguracija 449
L-nivo 262
Lorencova sila 38
Lorencova teorija Zemanovog efekta 221

M

Magični brojevi 540
Magnetni dipol 159
Magentni moment
– atoma 149
– orbitni atomi vodonika 150
– spinski 153, 178
– strujne konture 149
– ukupni 188
Magnetno polje atoma 168
Maksvel-Bolcmanova statistika 232
Maksvelove jednačne 69, 243, 456
Maseni broj 498
Mesbauerov efekt 545
Mezoni 560, 566
Milikenov ogled 31
Mionski atom 102
Modeli atoma → atomski modeli
Modeli jezgra 504
Moment impulsa (ugaoni moment)
– kod centralnog kretanja 474
– kvantovanje 182, 188
– orijentacija u prostoru (prostorno kvantovanje) 127
– orbitni 198
– spinski 200
– ukupni 201
– u sfernim koordinatama 424
Moslijev zakon 265

N

Natrijum
– dublet 228
– dublet u magnetnom polju 228
– elektronska konfiguracija 450
Neon
– elektronska konfiguracija 449
Neutrino 533
Neutron
– magnetni moment 499
– poluprečnik 499
– spin 499
Normiranje talasne funkcije 348
Nuklearna izomerija 539
Nuklearna (jaka) sila 497, 504
Nuklearna (slaba) sila 497
Nukleoni 499

NJ

Njutnovi zakoni 11

O

Očekivana vrednost
– energije 337
Operatori
– ermitski 339
– Fokov 446
– Hamiltonov 349
– izmene 442
– jednoelektronski 444
– Kulonov 442
Orbitni ugaoni moment 173
Ožeovi elektroni 263

P

Paladijum
– elektronska konfiguracija 450
Paramagnetizam 152
Parametar sudara 480
Pašenova spektralna serija 87
Paulijev princip isključenja 438
Perenovi ogledi
– aparatura za merenje raspodele čestica 23, 28
– jednačina za određivanje Avogadrovog broja 28
– putanje čestica kod Braunovog kretanja 28
Periodni sistem elemenata 575
Pfundova spektralna serija 87
Pikeringova serija He^+ jona 107
Pioni 559
Plankova konstanta 75
Plankov zakon zračenja 75

Pobuđivanje (ekscitacija) atoma
– određivanje energije 99
– sudarima s elektronima 98
p orbitale 412
Potencijalna barijera 360
Potencijalna jama 376
Pozitivni zraci 8
Pozitron
– teorija 542
Pozitronijum atom 102
Pravila izbora 465
Precesija u magnetnom polju
– orbitnog (ugaonog i magnetnog) momenta 155, 160
– spinskog (ugaonog i magnetnog) momenta 163
– ukupnog (ugaonog i magnetnog) momenta 163
Princip neodređenosti 318
Prirodna širina pobuđenog stanja 325
Proton
– magnetni moment 499
– masa 499
– poluprečnik 499
– spin 499

R

Raderfordova jednačina 487
Rederfordov ogled 473
Radioaktivnost 511
Radijalna distribuciona funkcija 416
Radijalna talasna funkcija 408
Radijalna Šredingerova jednačina 404
Radon
– elektronska konfiguracija 451
Ramzauer-Taunsendov efekt 382
Redni broj atoma 487
Redukovana masa 94
Rejli-Džinsov zakon 69
Rejlijev broj 73
Relacije neodređenosti 318
Relativistička veza između mase i energije 267
Relativističke jednačine 267
Rendgenski spektri 259
Ricov kombinacioni princip 87
Ridbergova spektralna formula
– konstanta 86, 92
Ridbergovi atomi 102

S

Sedimentaciona ravnoteža 24
Sferni harmonici 417
Simetrična talasna funkcija 437
Slejterova determinanta 445
s orbitale 411
Spektralne serije
– alkalnih atoma 136
– vodonikovog atoma 85
Spektralni term 89
Spinorbitala 443
Spin-orbitna interakcija
– konstanta spin-orbitne sprege 165, 192
Spinski magnetni moment elektrona 153
Spinska talasna funkcija 440
Spinski ugaoni moment (spin)
– elektrona 126
– intenzitet 143, 150
Spontana emisija 4
Sprezanje momenata 187
Srednja vrednost
– klasični izraz 341
– kvantnomehanička 433
Srednja vrednost energije 433
Srednji slobodni put 209
Standardni model 570
Stimulisana emisija 323, 460
Stoks-Ajnštajnova jednačina 20
Stoksov zakon 12
Struja gustine verovatnoće 352
Subatomske čestice 553
Svojstvene funkcije 349
Svojstvene vrednosti 349
Svojstveni problem operatora 339

Š

Šredingerova jednačina
– atoma helijuma 431
– atoma sa N elektrona 444
– atoma vodonika 391
– stacionarna 337, 355
– vremenski zavisna 346
Štern-Gerlahov ogled 206

T

Talasna jednačina 337
Talasne funkcije atoma helijuma 431
Talasne funkcije vodonikovog atoma
– radijalna 404
– sferni harmonici 417
– ugaoni po φ 400
– ugaone po θ 402
Talasni paket 291
Talasni vektor 63
Term 89, 139, 146, 193
Tomasov faktor 168
Tomsonov metod parabola 59
Transfermijevski elementi 452
Transuranski elementi 452
Tricijum 102, 499
Tunel efekt 516

U

Ugaone talasne funkcije
– po φ 400
– po θ 402
Ugaoni moment → moment impulsa
Ugljenik
– elektronska konfiguracija 449
Ukupni magnetni moment 188
Uzmak jezgra 535

V

Varijacioni metod 433
Vektorski model atoma 172
Verovatnoća apsorpcije 460
Verovatnoće optičkih kvantnih prelaza 460
Verovatnoća spontane emisije 460
Verovatnoća stimulisane emisije 460
Vodonikov atom → atom vodonika
Vreme života 326

Z

Zakočno zračenje 215
Zakoni održanja 562
– barionskog broja 564
– leptonskog broja 563
– stranosti 565
Zakon radioaktivnog raspada 513
Zemanov efekt
– anomalni 226
– normalni 215, 220
Zračenje dipola
– kvantnomehanički izraz 462
– srednja energija (klasični izraz) 455

Ž

Žiromagnetni odnos
– orbitni 153
– spinski 154

X

x-zračenje
– apsorpcioni spektar 265
– difrakcija na kristalima 249
– karakteristično 259
– kontinualno 259

SADRŽAJ

Strana

PREDGOVOR DRUGOM IZDANJU 5
1. ATOMISTIKA I ATOMISTIČKI POGLED NA STRUKTURU MATERIJE . . . 7
1.1 Uvod 7
1.2 Potvrda atomističke hipoteze 11
1.2.1 Elementarna teorija Braunovog kretanja 16
1.2.2 Perenovi ogledi 23
2. ATOM ELEKTRICITETA – ELEMENTARNO NAELEKTRISANJE 31
2.1 Naelektrisanje elektrona – Milikenov ogled 31
2.2 Kretanje elektrona (naelektrisane čestice) u električnom i magnetnom polju . 36
2.2.1 Naelektrisana čestica (elektron) u električnom polju 44
2.2.2 Naelektrisana čestica u magnetnom polju: vektori brzine i polja uzajamno normalni 46
2.2.3 Čestica u homogenom magnetnom polju – opšti slučaj 48
2.2.4 Elektron u električnom polju konačnih dimenzija 51
2.2.5 Elektron u magnetnom polju konačnih dimenzija 54
2.2.6 Elektron u kombinovanom električnom i magnetnom polju konačnih dimenzija – normalna polja 55
2.2.7 Elektron u kombinovanom električnom i magnetnom polju konačnih dimenzija – paralelna polja 57
3. KVANT DEJSTVA 61
3.1 Zračenje crnog tela 61
3.1.1 Eksperimentalno proučavanje zračenja crnog tela 66
3.1.2 Zakoni zračenja crnog tela 68
3.1.3 Rejli-Džinsov i Vinov zakon zračenja 69
3.2 Plankov zakon zračenja 75
4. STARA KVANTNA TEORIJA 85
4.1 Optički spektar vodonikovog atoma 85
4.1.1 Balmerova serija 85
4.1.2 Lajmanova, Pašenova i druge serije 87
4.2 Borov model atoma 89
4.2.1 Osnovne interakcije 89
4.2.2 Borovi postulati 91
4.2.3 Ridbergova konstanta i spektralne serije 92

Strana
4.2.4 Zavisnost Ridbergove konstante od mase jezgra 94
4.3 Frank–Hercovi ogledi 98
4.3.1 Pobuđivanje atoma sudarima – određivanje energije pobuđivanja (ekscitacije) 98
4.3.2 Određivanje energije jonizacije 101
4.4 Sistemi slični atomu vodonika 102
4.4.1 Izotopi vodonika 103
4.4.2 Jednoelektronski joni 104
4.5 Borov model i princip korespondencije 107
4.6 Bor-Zomerfeldova teorija 110
4.6.1 Harmonijski oscilator 117
4.6.2 Atom vodonikovog tipa 119
4.6.3 Bor-Zomerfeldovo kvantovanje 123
4.6.4 Prostorno kvantovanje 127
4.6.5 Kvantni broj n_φ i fina struktura linija vodonikovog spektra 131
4.7 Spektri atoma alkalnih metala 136
4.7.1 Efektivno naelektrisanje i konstanta zaklanjanja 138
4.7.2 Efektivni kvantni broj i kvantni defekt 140
4.8 Fina struktura spektara alkalnih metala i spin elektrona 143
5. ATOM – ORBITNI I SPINSKI MAGNETIZAM 149
5.1 Magnetni moment atoma vodonika 149
5.1.1 Orbitni magnetni moment 150
5.1.2 Spinski magnetni moment 153
5.2 Precesija i orijentacija (orbitnog i spinskog) magnetnog momenta u magnetnom polju 155
5.2.1 Precesija orbitnog magnetnog momenta u magnetnom polju 160
5.2.2 Orijentacija orbitnog momenta u magnetnom polju 161
5.2.3 Precesija i orijentacija spinskog magnetnog momenta u spoljašnjem magnetnom polju 163
5.3 Spin-orbitna interakcija 165
5.3.1 Poreklo lokalnog magnetnog polja 166
5.3.2 Interakcija spinskog magnetnog momenta i lokalnog magnetnog polja . 169
5.4 Vektorski model atoma 172
5.4.1 Elementi vektorskog modela: vektori ugaonog i magnetnog momenta . . 173
5.4.2 Mehanizam sprezanja momenta 179
5.4.3 Ukupni ugaoni moment 182
5.4.4 Ukupni magnetni moment 188
5.4.5 Spin-orbitno sprezanje 191
6. ATOM U MAGNETNOM POLJU 197
6.1 Ugaoni moment u magnetnom polju 197
6.1.1 Orbitni ugaoni moment u magnetnom polju 198
6.1.2 Spinski ugaoni moment u magnetnom polju 200
6.1.3 Ukupni ugaoni moment u magnetnom polju 201
6.2 Štern-Gerlahov ogled 206
6.2.1 Opis ogleda 209
6.2.2 Tumačenje rezultata 213
6.3 Zemanov efekt 215
6.3.1 Normalni Zemanov efekt 220

Strana
6.3.2 Klasična (Lorencova) teorija normalnog Zemanovog efekta 221
6.3.3 Opis Zemanovog efekta preko vektorskog modela atoma 224
6.3.4 Anomalni Zemanov efekt 226
7. FOTON – ELEKTROMAGNETNI KVANT 231
7.1 Fotoelektrični efekt 231
7.2 *x*-zračenje 249
7.2.1 Difrakcija *x*-zračenja na kristalnoj rešetki 250
7.2.2 Bragov metod difrakcije *x*-zračenja na kristalima 255
7.2.3 Metod kristalnog praha (Debaj-Šererova metoda) 258
7.2.4 Kontinualno i karakteristično rendgensko zračenje 259
7.2.5 Fina struktura rendgenskih spektralnih linija 264
7.2.6 Mozlijev zakon 265
7.2.7 Rendgenski apsorpcioni spektri 265
7.3 Komptonov efekt 267
8. KORPUSKULARNO-TALASNI DUALIZAM 277
8.1 De Broljijeva jednačina 277
8.1.1 Eksperimentalna potvrda De Broljijeve hipoteze 278
8.1.2 Devison-Džermerov eksperiment 279
8.1.3 Difrakcija elektrona – Tomsonova metoda 284
8.1.4 Difrakcija neutralnih atoma 286
8.1.5 Difrakcija molekula 288
8.1.6 Tumačenje Borovog kvantnog uslova pomoću De Broljijeve jednačine . 290
8.1.7 Jednačina De Broljijevih talasa 290
8.2 Čestica kao talasni paket 291
8.2.1 Talasni paket i Furijeova analiza 313
8.3 Princip neodređenosti 318
8.3.1 Talasni paket i relacije neodređenosti 320
8.3.2 Prirodna širina spektralnih linija 325
8.3.3 Difrakcija elektrona i relacija neodređenosti 330
8.3.4 Relacija neodređenosti i merenje položaja elektrona 334
8.4 Šredingerova jednačina 337
8.4.1 Bornovo tumačenje talasne funkcije 347
8.4.2 Svojstvene funkcije i svojstvene vrednosti 349
8.4.3 Struja gustine verovatnoće 352
8.5 Stacionarna Šredingerova jednačina 355
8.5.1 Mlaz elektrona 357
8.5.2 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: energija čestice E je veća od potencijalne energije barijere U, E > U 360
8.5.3 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: energija čestice E manja je od potencijalne energije barijere U, E < U 364
8.5.4 Prolaz čestice sa energijom E kroz pravougaonu jednodimenzionu potencijalnu barijeru U konačne širine *a* E < U 367
8.5.5 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: trodimenzioni slučaj sa sfernom simetrijom 371
8.6 Potencijalne jame 376
8.6.1 Čestica u jednodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima 376
8.6.2 Čestica u trodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima 379
8.6.3 Prolaz čestice kroz pravougaonu potencijalnu jamu; Ramzauerov efekt . 382

Strana
9. ATOM – KVANTNOMEHANIČKA SLIKA 391
9.1 Atom vodonika 391
9.1.1 Transformacija koordinata 391
9.1.2 Transformacija pravouglih (Dekartovih) u sferne koordinate 396
9.1.3 Razdvajanje promenljivih u Šredingerovoj jednačini za vodonikov atom i za sisteme slične vodoniku 399
9.1.4 Rešavanje ugaone Šredingerove jednačine (po φ) 400
9.1.5 Rešavanje ugaone Šredingerove jednačine (po θ) 402
9.1.6 Rešavanje radijalne Šredingerove jednačine 404
9.1.7 Atomske orbitale 410
9.1.8 Orbitni ugaoni moment 423
9.2 Atomi sa više elektrona 427
9.2.1 Šredingerova jednačina atoma sa N elektrona 427
9.2.2 Atom helijuma 431
9.2.3 Primena varijacione metode na He atom 434
9.2.4 Uticaj spina na energiju i talasne funkcije atoma (He) 437
9.2.5 Atomi sa više elektrona 444
9.2.6 Periodni sistem elemenata 448
9.3 Atom i zračenje energije 454
9.3.1 Klasična teorija zračenja 455
9.3.2 Verovatnoće optičkih kvantnih prelaza 460
9.3.3 Kvantnomehanička slika zračenja – dipolni moment prelaza 462
9.3.4 Pravila izbora 465
10. ATOMSKO JEZGRO 473
10.1 Raderfordov ogled 473
10.1.1 Rasejavanje alfa-čestica na tankoj foliji 477
10.1.2 Čestica u polju centralne sile (alfa-čestica u polju jezgra) 478
10.1.3 Klasični opis eksperimenta rasejavanja 482
10.1.4 Rasejavanje alfa-čestica na atomskom jezgru 485
10.1.5 Upoređivanje Raderfordove jednačine s eksperimentom 487
10.2 Osobine atomskog jezgra 497
10.2.1 Sastav jezgra 498
10.2.2 Defekt mase 501
10.2.3 Veličina i oblik atomskog jezgra 502
10.2.4 Sile u jezgru – jaka sila 504
10.3 Modeli jezgra 505
10.3.1 Model kapi 505
11. RASPAD ATOMSKOG JEZGRA – RADIOAKTIVNOST 511
11.1 Raspad jezgra: energijski bilans i raspad kao statistička pojava 511
11.2 Alfa-raspad 514
11.2.1 Emisija alfa-čestice iz jezgra – tunel efekt 516
11.3 Beta-raspad 524
11.3.1 K-zahvat 531
11.3.2 Neutrino i antineutrino 533
11.4 Gama-zračenje 535
11.4.1 Nuklearna izomerija 539
11.4.2 Unutrašnja konverzija gama-zračenja 540
11.4.3 Gama-zračenje i nastajanje parova čestica – antičestica 541

Strana
11.4.4 Teorija pozitrona 542
11.4.5 Mesbauerov efekt 545
12. SUBATOMSKE ČESTICE 553
12.1 Istorijski osvrt 553
12.2 Osnovne sile 555
12.2.1 Gravitaciona sila 555
12.2.2 Slaba sila 556
12.2.3 Elektromagnetna sila 556
12.2.4 Jaka sila 557
12.2.5 Kvanti polja – prenosioci sile 557
12.2.6 Vreme delovanja i domet sila 558
12.3 Familije čestica 559
12.3.1 Leptoni 559
12.3.2 Mezoni 560
12.3.3 Barioni 560
12.4 Čestice i antičestice 561
12.5 Zakoni održanja 562
12.5.1 Održanje leptonskog broja 563
12.5.2 Održanje barionskog broja 564
12.5.3 Održanje stranosti 565
12.6 Model kvarka 565
12.6.1 Mezoni 566
12.6.2 Barioni 567
12.6.3 Osnovna pravila za reakcije kvarkova 568
12.6.4 Novi kvarkovi: c, b, t 568
12.7 Standardni model 570
PERIODNI SISTEM ELEMENATA 575
PREPORUČENE VREDNOSTI OSNOVNIH FIZIČKIH KONSTANTI 577
FIZIČKE OSOBINE ELEMENATA 583
STANDARDNE ATOMSKE TEŽINE KOJE PREPORUČUJE IUPAC 587
OSOBINE STABILNIH JEZGARA 589
LITERATURA 603
INDEKS POJMOVA 607

Tehnički urednici:
Jovan ARANĐELOVIĆ
Slobodan KOVAČIĆ

Korice
Bogdan KRŠIĆ

Korektura
JP Službeni list SCG

Obim
$38^3/_4$ štam. tabaka

Format
17 x 24 cm

Tiraž
500 primeraka

Štampa
ATELJE BOGDANOVIĆ – Beograd

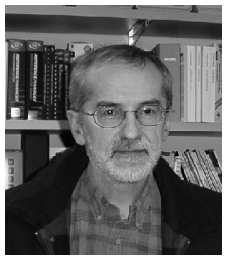
CIP – Katalogizacija u publikaciji
Narodna biblioteka Srbije, Beograd

539.1(075.8)

MACURA, Slobodan
Atomistika / Slobodan Macura, Jelena Radić-Perić. – 2. prerađeno i dopunjeno izd. – Beograd: Službeni list SCG: Fakultet za fizičku hemiju, 2004 (Beograd: Bogdanović). – 620 str.: ilustr.; 24 cm

Tiraž 500. – Bibliografija: str. 601-603. – Registar.

ISBN 86-355-0627-8
1. Radić-Perić, Jelena a) Atomska fizika
COBISS.SR-ID 115715084



Slobodan Macura rođen je 1948. u Stanišiću. Na grupu Fizička hemija Prirodno-matematičkog fakulteta u Beogradu upisao se 1967. godine, diplomirao je 1972, a doktorirao 1978. Godinu 1978/80 proveo je u Laboratoriji za fizičku hemiju (ETH, Cirih) u grupi profesora Ričarda Ernsta (Nobelova nagrada za hemiju 1992), a 1980/81 u grupi profesora Kurta Vitriha (Nobelova nagrada za hemiju 2002), u Institutu za biofiziku i molekularnu biologiju ETH. U periodu od 1981. do 1990. bio je gost na nekoliko univerziteta u SAD, Evropi i Australiji. U Institutu za fizičku hemiju Prirodno-matematičkog fakulteta u Beogradu držao je predavanja iz Atomistike. Sada je profesor biohemije u Poslediplomskoj školi Mejo fondacije (Ročester, Minesota, SAD), konsultant na Mejo klinici i direktor Laboratorije za analitičku nuklearnu magnetnu rezonanciju. Član je nekoliko naučnih društava u zemlji i inostranstvu. Godine 2000. izabran je u SANU.

Jelena Radić-Perić rođena je 1948. godine u Beogradu. Na grupu Fizička hemija Prirodno-matematičkog fakulteta u Beogradu upisala se 1966, diplomirala je 1970, a magistrirala 1974. Stekla je titulu doktora prirodnih nauka na Rajnskom Fridrih-Vilhelm univerzitetu u Bonu 1977. Kao redovni profesor Univerziteta u Beogradu drži predavanja iz Atomistike i Fizičke hemije plazme na Fakultetu za fizičku hemiju. Član je više naučnih društava u zemlji i inostranstvu.