1. predavanje

Vladimir Dananić

3. listopada 2011.

Sadržaj

Elektromagnetsko zračenje i temperatura

U ovom ćemo se poglavlju baviti odnosom elektromagnetskoga zračenja makroskopskih tijela i njihove temperature. Zašto govorimo o makroskopskim tijelima, a ne o atomima i molekulama koje sadrže naboje i proizvode elektromagnetsko zračenje? Moramo se prisjetiti značenja pojma temperature. Naime, definicija temperature pojedinačnih atoma i molekula vrlo je dvojbena stvar, ako uopće takva definicija i može postojati. Pojam temperature podrazumijeva postojanje velikoga mnoštva pojedinačnih gradbenih jednica određenoga sustava. Temperaturu pripisujemo sustavu kao cjelini, a ne njegovim osnovnim gradbenim jedinicama. Kažemo da su dva sustava u toplinskoj ravnoteži ako su im temperature jednake. Ako promatramo jako velike sustave, kao što je Zemljina atmosfera, ili Sunce, ili neka druga zvijezda, onda možemo govoriti o temperaturi manjih, ili relativno jako malih, dijelova sustava koji imaju neku određenu temperaturu. Naime, ni atmosfera planeta Zemlje, ni Sunce, ni bilo koja druga zvijezda, nije, kao cjelina, u toplinskoj ravnoteži.

Elektromagnetsko zračenje i temperatura

Mi ćemo se baviti sustavom koji u svakom svom dijelu ima (približno) jednu te istu temperaturu, tj. svaki je dio sustava u toplinskoj ravnoteži sa svim ostalim dijelovima sustava. Elektromagnetski val ima i gustoću energije i energetski tok. Prva veličina govori o tome koliko energije u prosjeku u jedinici volumena sadrži elektromagnetski val. Druga veličina govori o tome koliko energije, u prosjeku, elektromagnetski val donese na jedinicu površine, ili ju iz nje iznese. Nju opisujemo Poyntingovim vektorom $\vec{S}$. Svako makroskopsko tijelo prima, ili odašilje, elektromagnetske valove preko svoje površine, odnosno elemenata površine $d\vec{A}$. Energetski tok elektromagnetskoga vala $d\Phi$ određujemo izrazom:

$$d\Phi = \vec{S} \cdot d\vec{A} \tag{1}$$

Ukupni energetski tok određujemo izrazom:

$$\Phi = \oint_S \vec{S} \cdot d\vec{A} \tag{2}$$

Elektromagnetsko zračenje i temperatura

Po zakonu očuvanja ukupne energije, ukupni energetski tok Φ_{uk}, koji pada na određeno tijelo, u međudjelovanju s tijelom rasporedi se na tri toka:

- reflektirani tok Φ_r ,
- transmitirani tok Φ_t i
- apsorbirani tok Φ_a ,

tako da vrijedi zakon očuvanja:

$$\Phi_{uk} = \Phi_r + \Phi_t + \Phi_a \tag{3}$$

Prikladno je definirati tri koeficijenta: koeficijent refleksije ρ, transmisije τ i apsorpcije α, kao omjere:

$$\rho = \frac{\Phi_r}{\Phi_{uk}} \ , \ \tau = \frac{\Phi_t}{\Phi_{uk}} \ , \ \alpha = \frac{\Phi_a}{\Phi_{uk}} \tag{4}$$

tako da jednadžba (3) ima jednostavniji, bezdimenzionalni, oblik:

$$\rho + \tau + \alpha = 1 \tag{5}$$

Elektromagnetsko zračenje i temperatura

Općenito koeficijenti ρ, τ, α ovise o obliku, kemijskom sastavu, temperaturi tijela i valnoj duljini elektromagnetskoga vala (ili o frekvenciji). Možemo definirati tri vrste idealnih tijela, od kojih nijedno ne postoji u stvarnosti:

- idealno sjajno ("ulašteno") tijelo, za koje vrijedi $\rho = 1$, $\tau = 0$, $\alpha = 0$.
- idealno prozirno tijelo, za koje vrijedi $\rho = 0$, $\tau = 1$, $\alpha = 0$
- idealno crno tijelo, za koje vrijedi $\rho = 0$, $\tau = 0$, $\alpha = 1$

Za prva dva tijela možemo reći da ona ne izmjenjuju energiju s okolinom, barem ne u obliku elektromagnetskih valova. U tom smislu nam takva (nepostojeća) tijela nisu zanimljiva. Izmjena energije između tijela i okoline u obliku elektromagnetskih valova tiče se samo onih tijela (a to su gotovo sva) koja apsorbiraju elektromagnetske valove u cijelosti, odnosno barem u velikom postotku. Idealno crno tijelo možemo približno predočiti s pomoću čađe, ili grafita. Kada crno tijelo apsorbira energiju elektromagnetskih valova, ta se energija ne može izgubiti u ništa, nego se pretvori u toplinu.

Elektromagnetsko zračenje i temperatura

No, proces zagrijavanja ne će teći u nedogled, nego će se tijelo zagrijavati dotle dok ne postigne toplinsku, odnosno temperaturnu, ravnotežu. Kad postigne toplinsku ravnotežu, tijelo emitira elektromagnetske valove s jednakim intenzitetom s kojim i apsorbira zračenje, ako mu je koeficijent transmisije zanemarivo mali. Uvedimo koeficijent emisije e, na sličan način kako smo uveli koeficijente ρ, τ i α. Dakle,

$$e = \frac{\Phi_e}{\Phi_{uk}} \tag{6}$$

Ako nema transmisije, tj. ako je $\tau = 0$, onda vrijedi $\rho + \alpha = 1$. Upadni tok energije raspodijeli se na reflektirani tok i emitirani tok. To je jednostavno zakon očuvanja energije, tj. prvi zakon termodinamike. Time smo izrekli ovu jednostavnu činjenicu:

Ako nema transmisije zračenja i ako se samo dio upadnoga toka reflektira, onda se dio toka mora apsorbirati, pretvoriti u toplinu te emitirati. Emitirani tok zajedno s reflektiranim mora energetski uravnotežiti upadni tok.

Elektromagnetsko zračenje i temperatura

No, rekli smo da je emitirani tok u toplinskoj ravnoteži s tijelom koje ga emitira. To zapravo znači da samom emitiranom zračenju pripisujemo određenu temperaturu jednakoj s temperaturom tijela koje ga je emitiralo. Dakle, tijelo i emitirani tok su u toplinskoj ravnoteži. Jasno je da ovako definirani zračenje tijela ne ovisi o njegovu obliku, ni o sastavu ni o čemu bilo drugom što određuje tijelo, na sličan način kao što prvi zakon termodinamike ne ovisi ni o kojoj od navedenih značajki tijela. Za idealno crno tijelo kažemo da emitira "crno zračenje". Kao najbolji realni primjer idealnog crnog tijela često se navode šupljine s malim otvorom. Zidovi šupljine imaju neki koeficijent apsorpcije–što je taj koeficijent biskiji s 1, to bolje. Smatramo da gotovo sve zračenje koje kroz mali otvor uđe u šupljinu bude u njoj posve apsorbirano. Naime, ako i postoji geometrijski put zrake takav da nakon konačnoga broja refleksija zraka "pronađe put" prema van kroz isti otvor, zanemarivo je vjerojatno da će se to dogoditi, zato što se pri svakoj refleksiji zraka djelomice apsorbira te nakon velikoga broja refleksija, prije nego što "pronađe put prema van", bude potpuno apsorbirana.

Spektralna razdioba

Toplinsko zračenje sadrži valove sviju frekvencija (ili valnih duljina). Pitanje je koliko energije u emitiranom toku "pripada" određenoj frekvenciji (boji) elektromagnetskoga vala. Ne postoji nikakav razuman razlog za pretpostavku da je ukupna energija emitiranoga toka jednoliko raspoređena po svim frekvencijama. Zapravo, takva bi pretpostavka bila u sukobu s činjenicom da je frekvencija kontinuirana veličina, raspon koje se proteže od $\nu = 0$ pa do $\nu = +\infty$. Ako bi na sve frekvencije "padala" jednaka količina energije, ma kako mala, ukupna bi energija bila beskonačna. A to proturječi zbilji oko nas–emitirana je toplinska energija mjerljiva i uvijek je konačna. To je dovoljan razlog za definiranje jedne funkcije, koju ćemo zvati **gustoća spektralne razdiobe**. To znači da ćemo gustoću emitirane energije u prikazati u sljedećem obliku:

$$u = \int_0^{+\infty} U(\nu) d\nu \qquad (7)$$

Spektralna razdioba–Kirchhoffova hipoteza

Razdioba $U(\nu)$ u jednadžbi (7) nam govori koliki dio emitirane gustoće energije pripada valovima kojih se frekvencija nalazi između ν i $\nu + d\nu$. Ta se funkcija može eksperimentalno mjeriti. Jasno je da ta funkcija ovisi i o temperaturi. No, prije smo govorili o energetskom toku, a ne o gustoći energije. Iz Maxwellovih jednadžbi znamo da su gustoća energije, koja je određena kvadratima električnoga i magnetskoga polja, i energetski tok, odnosno intenzitet svjetlosti koji je određen Poyntingovim vektorom, u vrlo jednostavnom odnosu. Naime, te su veličine razmjerne jedna drugoj, pri čemu konstanta razmjernosti ne ovisi o frekvenciji vala. Dakle, možemo govoriti o spektralnoj razdiobi intenziteta na isti način kao i o razdiobi gustoće energije. Također možemo govoriti o ovisnosti koeficijenata emisije i apsorpcije o frekvenciji i temperaturi. Kirchhoffova je hipoteza da su ta dva koeficijenta jednaka za svaku posebnu frekvenciju i za svako tijelo. Ta je hipoteza kontroverzna kada govorimo o realnim makroskopskim tijelima, ali možemo reći da vrijedi za (nepostojeće) idealno crno tijelo.

Spektralna razdioba

Prije smo izveli rezultat da je broj valova dNu volumenu V, koji imaju frekvenciju između ν i $\nu + d\nu$ jednak

$$dN = V\frac{8\pi}{c^3}\nu^2 d\nu \tag{8}$$

Elektromagnetski val možemo predočiti kao određeni oscilator frekvencije ν. Iz klasične statističke fizike slijedi da je prosječna energija harmoničkog oscilatora u sustavu s temperaturom T jednaka $k_B T$, gdje je k_B Boltzmannova konstanta. Naime, harmonički oscilator ima i kinetičku i potencijalnu energije, i te su dvije energije u prosjeku jednake. Budući da na svaki stupanj slobode spada energija $\frac{1}{2}k_B T$, za harmonički će oscilator to biti točno 2 puta više, jer ima i kinetičku i potencijalnu energiju. Dakle, gustoća će energije elektromagnetskoga vala biti jednaka:

$$du = \frac{k_B T}{V}dN = \frac{8\pi}{c^3}k_B T\nu^2 d\nu \;\Rightarrow\; U(\nu, T) = \frac{du}{d\nu} = \frac{8\pi}{c^3}k_B T\nu^2 \tag{9}$$

Spektralna razdioba

Rezultat klasične fizike, koji je opisan jednadžbom (9), poznat je pod nazivom Jeans-Rayleighova formula. Taj je rezultat zapravo je katastrofalan. Naime, po toj bi jednadžbi ukupna energija zračenja bila beskonačna. Zato je taj rezultat dobio naziv "ultraljubičasta katastrofa", jer kaže da bi pri svakoj temperaturi emisija imala to veći intezitet što je viša frekvencija valova. Bilo je raznih pokušaja da se taj rezultat popravi, da se nekako "urazumi", ali se u okvirima klasične fizike nije uspjelo naći lijeka za tu katastrofu. Prije nastavka priče ustanovimo još jedan, već prije spomenuti detalj, a taj je odnos između gustoće energije i intenziteta I. Naime, za **jedan** monokromatski val imamo odnos $u = \frac{I}{c}$, gdje je c brzina elektromagnetskoga vala (svjetlosti). Pretpostavit ćemo da se zračenje zbiva u vakuumu. Tada je c brzina svjetlosti u vakuumu. No, zračenje je tijela izotropno, tj. jednako u svim smjerovima, a jedan elektromagnetski val ima samo jedan smjer. Zato valja spomenuti odnos zbrojiti po svim smjerovima, tj. integrirati po prostornom kutu. A taj prostorni kut iznosi 4π. Znači da za idealno crno tijelo vrijedi odnos $u = \frac{4\pi}{c} I$.

Planckova hipoteza

Problem s Jeans-Rayleighovom formulom očito se nalazi u tome što se svakom valu pripisuje statistički jednaka energija. Naime, rezultat je klasične statističke fizike da je gustoća vjerojatnosti da određeni dio sustava, čak i sama čestica sustava, u toplinskoj ravnoteži na temperaturi T ima energiju E jednaka

$$P(E) = Ze^{-\frac{E}{k_B T}} \tag{10}$$

pri čemu je Z konstanta odabrana tako da zbroj (integral) sviju vjerojatnosti bude jednak 1. Po čemu se integrira? U klasičnoj se fizici stanje neke čestice ukupne energije E, koja se giba u trodimenzijskom prostoru, može ostvariti na beskonačno puno načina. Recimo da čestica ima samo kinetičku energiju. Ona je razmjerna **kvadratu** količine gibanja čestice $\vec{p}$, što znači da ne ovisi o smjeru gibanja čestice. A tih smjerova ima beskonačno puno. Također, čestica može imati kinetičku energiju od vrijednosti 0 pa do beskonačno. Dakle, integriramo po svim mogućim smjerovima i po cijelom intervalu iznosa količine gibanja.

Planckova hipoteza

Na sličan bismo način postupili i s potencijalnom energijom, samo što ona ovisi o položaju a ne i o brzini čestice. Dakle, naš je "prostor događaja" cijeli volumen V i cijeli "volumen" u prostoru količine gibanja. Dakle, vjerojatnost dW da se količina gibanja čestice nalazi između $\vec{p}$ i $\vec{p}+d\vec{p}$ u dijelu prostora između $\vec{r}$ i $\vec{r}+d\vec{r}$ iznosi

$$dW = Ze^{-\frac{E(\vec{p},\vec{r})}{k_B T}} d^3\vec{p} d^3\vec{r} \tag{11}$$

gdje je Z tzv. particijska funkcija koja izražava normiranje ukupne vjerojatnosti na 1. Dakle:

$$Z = \left(\int e^{-\frac{E(\vec{p},\vec{r})}{k_B T}} d^3\vec{p} d^3\vec{r} \right)^{-1} \tag{12}$$

Budući da imamo ukupno N čestica, jednadžbe (11) i (12) poopćujemo tako da "fazni volumen" $d^3\vec{p}d^3\vec{r}$ jedne čestice poopćimo na N čestica, tj prikažemo kao umnožak "faznih volumena" sviju čestica, a ukupna je energija zbroj pojedinačnih energija sviju čestica.

Planckova hipoteza

Prosječna se energija bilo koje veličine O računa na sljedeći način:

$$\langle O \rangle = Z \int O(\vec{p}, \vec{r}) d^3\vec{p} d^3\vec{r} \tag{13}$$

Iz ove definicije slijedi da je prosječna energija jednog harmoničkog oscilatora jednaka $k_B T$. U Boltzmannovu se razdiobu, opisanu jednadžbom (11), nije smjelo sumnjati, zato što je statistička fizika zasnovana na njoj, odnosno statistička termodinamika, bila (i sada je) u savršenoj suglasnosti s fenomenološkim zakonima termodinamike. Drugim riječima, Boltzmannova je razdioba po energijama sasvim sigurno dobra. Gdje je izlaz? Planckova je hipoteza bila da energija harmoničkoga oscilatora ne ovisi o dinamičkim varijablama $\vec{r}$ i $\vec{p}$ nego samo o frekvenciji oscilatora ν i to na vrlo jednostavan način:

$$E_n = nh\nu \ , \ \ n = 0, 1, 2, ... \tag{14}$$

Zapravo, Planck je klasične dinamičke varijable oscilatora zamijenio s jednom dinamičkom, diskretnom varijablom, naime prirodnim brojem n.

Planckova hipoteza

Drugim riječima, po toj hipotezi energija oscilatora nije kontinuirana veličina nego je diskretna, tj. može poprimati vrijednosti samo kao cjelobrojni umnožak jednog “obroka” energije, iliti kvanta. Energija kvanta razmjerna je frekvenciji oscilatora. Konstanta razmjernosti h zove se Planckova konstanta. Max Planck je svoju hipotezu iznio 1900. godine. I što je dobio? Dobio je da je prosječna energija oscilatora jednaka:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} nh\nu e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \tag{15}$$

Brojnik jednadžbe (15) sadrži energiju jednoga kvanta. Kada je ta energija, $h\nu$, znatno manja od toplinske energije $k_B T$, tada se jednadžba (15) poklapa s klasičnim rezultatom, naime $< E > \approx k_B T$. U obrnutom slučaju, kada je energija jednoga kvanta znatno veća od $k_B T$, prosječna energija postaje zanemarivom mala. Dakle, kvantiziranje energije oscilatora jednostavno “odreže” spektar vrijednosti energije oscilatora i time izbjegne ultraljubičastu katastrofu.

Planckova hipoteza

Iz izraza za prosječnu energiju oscilatora (15) Planck je dobio izraz za spektalnu razdiobu intenziteta:

$$I = \int_0^{+\infty} I(\nu, T) d\nu \ , , \ I(\nu, T) = \frac{c}{4\pi} U(\nu, T) = \frac{c}{4\pi} \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 \langle E \rangle$$

$$I(\nu, T) = \frac{2\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} = \frac{2h}{c^2} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \qquad (16)$$

Planckov je rezultat (16) ostao nezapažen, premda je bio u savršenom suglasju s eksperimentom. Planckovi su suvremenici smatrali da je "kvantiziranje energije oscilatora" samo nekakvo tehničko rješenje, bez ikakve fizikalne podloge. I bili su u pravu– naime, kvantiziranje se energije ne može izvesti iz zakona klasične fizike. Ono mora biti postulirano, što je Planck i učinio.

Planckova hipoteza i fotoelektrični učinak

No, Einstein je Planckovu hipotezu shvatio jako ozbiljno i njome je objasnio fotoelektrični učinak. Što je taj učinak i u čemu je bila nevolja u objašnjenju toga učinka? Bilo je primiješeno da određeni materijali izbacuju elektrone kada ih se obasja svjetlošću. S klasičnim objašnjenjem toga učinka postojale su dvije poteškoće:

- Kinetička energija izbijenih elektrona ne ovisi o intenzitetu svjetlosti. Ta je činjenica u potpunom sukobu s klasičnim poimanjem vala, odnosno njegove energije. Val ima to veću energiju što mu je veći intenzitet. Dakle, djelovanje elektromagnetskoga polja na nabijene čestice moralo vi ovisiti o amplitudama električnoga i magnetskoga polja, dakle o intenzitetu svjetlosti. A bilo je zapaženo upravo suprotno tome.
- Elektroni nisu izbačeni iz materijala ako je frekvencija svjetlosti niža od neke granične vrijednosti, što je opet u sukobu s klasičnim poimanjem po kojemu intenzitet vala, a prema tome i energija, ne ovisi o frekvenciji nego samo o amplitudi polja.

Planckova hipoteza i fotoelektrični učinak

Einsteinovo je objašnjenje fotolektričnoga učinka bilo jednostavno. Naime, riječ je o sudaru "kvanta svjetlosti", kojega je Einstein nazvao fotonom, energije $h\nu$ i elektrona. Pri tome sudaru vrijede zakoni očuvanja energije i količine gibanja. Zakon očuvanja energije kaže da se energija kvanta raspodijeli na kinetičku energiju izbačenoga elektrona i na rad koji je nužno izvršiti da bi elektron uopće bio "iščupan" iz materijala. To se zove izlazni rad. Dakle, vrijedi jednadžba:

$$h\nu = E_{kin} + W_{iz} \tag{17}$$

Iz jednadžbe je (17) odmah vidljivo da kinetička energija elektrona ne ovisi o intenitetu svjetlosti. Naime, u toj jednadžbi nigdje nema amplitude elektromagnetskoga polja. Također je vidljivo da postoji neka najniža, granična, frekvencija ν_g, pri kojoj je kinetička energija elektrona jednaka 0, što znači da elektron "samo što nije iščupan". Za tu graničnu frekvenciju vrijedi jednostavan odnos–energija "graničnoga" kvanta jednaka je izlaznom radu: $h\nu_g = W_{iz}$.

Planckova hipoteza i fotoelektrični učinak

Einsteinovo se objašnjenje fotoelektričnoga učinka savršeno slagalo s eksperimentom. To je bila prva pobjeda Planckove hipoteze, u kojoj je pojam kvanta dobio pravo građanstva u fizici. Planckova je hipoteza postala nešto što se shvaća jako ozbiljno. Ali, pri tome se moramo sjetiti davnih borbi oko pitanja je li svjetlost valne ili korpuskularne naravi. U 19. je stoljeću Fresnelovo objašnjenje ogiba smatrano tako jakim i dosljednim (što je i bilo) da je Newtonova korpuskularna teorija bila sasvim odbačena kao neprikladna. Svjetlost je postala valom, kojega znamo tumačiti i opisati Maxwellovim jednadžbama. Einsteinovo je objašnjenje fotoelektričnoga učinka vratilo na "bojište" davno sahranjenu korpuskularnu teoriju svjetlosti. I kako sada da razuman čovjek odgovori na pitanje: je li svjetlost valne naravi, ili je čestične naravi?. Najprecizniji odgovor na takvo pitanje, zapravo je logički otvoren i glasi jednostavno **DA**. Naime, logičku operaciju "ili" ne smijemo shvatiti kao "isključivo ili".

Stefan-Boltzmannov zakon

Od prije je bio poznat fenomenološki zakon koji kaže da je snaga izračene topline iz određenoga objekta razmjerna površini objekta i četvrtoj potenciji apsolutne temperature. To je bilo poznato kao Stefan-Boltzmannov zakon. Taj se zakon može vrlo jednostavno izvesti iz Planckove spektralne razdiobe. Pri tome dobijemo mogućnost posrednog mjerenja Planckove konstante.

Bohrov model atoma

Sljedeća pobjeda Planckove hipoteze došla je od strane Nielsa Bohra. Bohr je napravio model atoma u kojemu se elektroni gibaju oko jezgre. Postojanje jezgre atoma bilo je dokazano Rutherfordovim eksperimentom. No, klasična je fizika tumačila da nabijene čestice u ubrzanom gibanju gube energiju u obliku zračenja elektromagnetshih valova. Dakle, ako bi se elektron gibao oko nabijene jezgre po, recimo, kružnoj putanji, on bi nužno imao centripetalno ubrzanje, i prema tome zračio bi i gubio energiju. To znači da njegovo gibanje ne dugo traja, nego bi se elektron “zabio” u jezgru i time bi atom na određeni nači “nestao”. No, Bohr je postulirao da se elektron ne može gibati po bilo kojoj kružnoj putanji, nego samo po određenim putanjama na kojima **ne zrači** energiju. Te su putanje kvantizirane tako da je kutna količina gibanja elektrona jednaka cjelobrojnom umnošku Planckove konstante podijeljenos s 2π.

Crtić

http://www.youtube.com/watch?v=Q1YqgPAtzho

Početci kvantne teorije

Postojanje kvanta svjetlosti, fotona, objašnjenje fotoelektričnoga učinka i uspjeh Bohrova modela atoma u objašnjenju spektra zračenja vodikovog atoma, otvorilo je mnoga pitanja. Bohrov je model vodikova atoma naznačio jednu važnu činjenicu. Naime, uvjet kvantizacije elektronske staze može se shvatiti kao uvjet da duljina staze, tj. opseg kružnice, po kojoj se giba elektron bude jednaka cjelobrojnom umnošku elektronske valne duljine. No, kakav uvjet možemo postaviti za stazu elektrona, ili koje druge čestice, ako staza nije zatvorena? Takav slučaj imamo s elektronom u fotoelektričnom učinku. Kada elektron izleti iz određenoga metala, njegova je staza jednaka stazi gibanja slobodne čestice, koja se giba jednoliko po pravcu i koja ima samo kinetičku energiju. Odgovor na to pitanje očito je u tome da čestica ima valnu duljinu u svakoj točci svoga položaja. No, može li čestica, poput elektrona, imati jedinstvenu valnu duljinu?. Naime, čestica nije val. Moramo se prisjetiti određenoga svojstva valova koje ima sličnosti s česticom.

Početci kvantne teorije

To se traženo svojstvo zove **valni paket**. Naime, linearnom superpozicijom mnoštva valova koji svi imaju bliske, ali različite, valne duljine možemo dobiti dobro “spakirani” val koji upravo tim svojim svojstvom, tj. “spakiranošću”, podsjeća na česticu. No, takav se val giba posebnom brzinom, koja nije povezana s jednom valnom duljinom nego je povezana s mnoštvom vrlo bliskih valnih duljina, odnosno valnih vektora. Ako se valni paket sastoji od valova valnih vektora s vrijednostima između k i $k + \Delta k$, a frekvencije tih valova ovise o valnim vektorima tako da imamo zadanu funkciju $\omega(k)$, onda je brzina valnoga paketa zadana funkcijom:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \tag{18}$$

Brzina zadana jednadžbom (18) zove se **grupna brzina**. To znači da ćemo za brzinu čestice smatrati da je to grupna brzina određenog mnoštva valova. Uzmimo slobodnu česticu. Njezina ukupna energija jednaka je njezinoj kinetičkoj energiji. Iz zahtjeva da čestica ima energiju jednoga kvanta, naime $E = \hbar\omega$, dobivamo sljedeću jednadžbu:

Početci kvantne teorije–de Broglieva hipoteza

$$\frac{m}{2}\left(\frac{d\omega}{dk}\right)^2 = \hbar\omega \tag{19}$$

Rješenje diferencijalne jednadžbe (19) je:

$$\omega(k) = \frac{\hbar}{2m}k^2 \tag{20}$$

Jednadžba (20) opisuje povezanost frekvencije i valnoga vektora valnoga paketa kojim opisujemo česticu-val, tj. kvant. Količina gibanja, tj. zalet, kvanta zadan je izrazom $p = mv_g$, odnosno:

$$p = m\frac{d\omega}{dk} = \hbar k = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \tag{21}$$

Jednadžba (21) zove se **de Broglieva relacija**(1924.g.). Ona povezuje količinu gibanja i valnu duljinu kvanta. Vrijedi jednako za nerelativističku kao i za relativističku mehaniku. Prva eksperimentalna potvrda de Broglieve hipoteze napravljena je 1927. godine.

Početci kvantne teorije–Davisson i Germer

Davisson i Germer napravili su difrakciju elektrona na kristalu nikla, i opazili odnos između količine gibanja elektrona i otklona elektrona tipičan za difrakciju vala valne duljine zadanoj de Broglievom relacijom. Poslije toga otkrića došlo je sljedeće vrlo važno otkriće zasnovano na de Broglievoj hipotezi: **elektronski mikroskop**. Prvi elektronski mikroskop napravio je Ernst Ruska 1933. godine. Načelo rada mikroskopa vrlo je jednostavno. Elektroni imaju određenu valnu duljinu te samo valja naći način da se naprave odgovarajuće leće za te valove. Te "leće", razumije se, ne mogu biti iste kao i leće za svjetlost, nego je riječ o tome da se odgovarajućim magnetskim poljima elektronske staze mogu mijenjati na način kako se mijenja smjer zrake svjetlosti u običnoj leći.

Heisenbergove relacije

Budući da ima i valna svojstva, položaj kvanta u prostoru nužno je neodređen. Jasno je da o njegovu položaju ne možemo govoriti s većom preciznošću no što je širina Δx valnoga paketa koji predočuje kvant. Ta nam je širina zadana sa širinom područja valnih vektora Δk, od kojih se sastoji valni paket. Naime, možemo dati vrlo značajnu procjenu

$$\Delta x \geq \frac{1}{\Delta k} \Rightarrow \Delta x \Delta k \geq 1 \Rightarrow \Delta x \Delta p \geq \hbar \tag{22}$$

Prvo što moramo uočiti u Heisenbergovoj relaciji neodređenosti (22) je to da je ona unutarnje svojstvo čestice-vala. Dakle, umnožak neodređenosti položaja i količine gibanje čestice-vala uvijek je veći od najmanje vrijednosti zadane s reduciranom Planckovom konstantom $\hbar$. (precizniji dokaz vodi na $\frac{\hbar}{2}$). To znači da načelno ne možemo istodobno s proizvoljnom preciznošću izmjeriti i položaj i količinu gibanja čestice-vala. Ako jedno od toga izmjerimo s proizvoljno visokom preciznošću, ona druga veličina ostat će posve neodređena.

Heisenbergove relacije

Primjer:
Procijenite energiju najnižeg, osnovnog, stanja vodikova atoma s pomoću Heisenbergove relacije neodređenosti.
Primjer:
Procijenite energiju osnovnoga stanja harmoničkog oscilatora mase $m = 10^{-27}\ kg$ i frekvencije $\omega = 10^{15}\ s^{-1}$.
Relacije neodređenosti imaju vrlo važnu posljedicu. Naime, čak i kada bismo u jednome sustavu posve uklonili toplinsko gibanje tako da sustav držimo na temperaturi $T = 0K$, ne bismo uklonili gibanje osnovnih jedinica sustava. To se gibanje zove **kvantne fluktuacije**. Područje niskih temperatura je često izvorište pojava povezanih s kvantnim ponašanjem materije. Uglavnom možemo reći da je uvjet pojavljivanja kvantnih pojava istovjetan s uvjetom da valna duljina kvanta bude istoga reda veličine kao i srednji slobodni put čestice u plinu na određenoj temperaturi. Ako je ta valna duljina puno manja od srednjeg slobodnog puta, možemo reći da se kvantne pojave mogu zanemariti.

Schrödingerova jednadžba

Moramo postaviti pitanje: koja je jednadžba gibanja kvanta. Drugi Newtonov zakon očito ne može dobro "funkcionirati" i to iz vrlo jednostavnoga razloga. Naime, 2. Newtonov zakon zahtijeva (načelno) proizvoljno točno poznavanje i položaja i brzine, odnosno ubrzanja, čestice. Po Heisenbergovim relacijama neodređenosti to nije moguće. Ne možemo definirati stazu kvanta, jer pojam staze podrazumijeva upravo suprotno od toga što kažu Heisenbergove relacije neodređenosti. Dakle, pitanja su **što je 2. Newtonov zakon za gibanje kvanta ? S čime moramo zamijeniti pojam staze i kakav je smisao uobičajenih klasičnih veličina poput položaja i količine gibanja ?**. Nesporna je jedna stvar, a ta je da moramo imati nešto što opisuje nekakav val, dakle nekakvu **valnu funkciju** $\Psi(x,t)$. Za slobodni kvant ta valna funkcija mora imati oblik:

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \tag{23}$$

Schrödingerova jednadžba

Energiju kvanta $E = \hbar\omega$ i njegovu količinu gibanja $p = \hbar k$ moramo nekako dobiti iz same valne funkcije. Tu imamo sljedeće matematičke jednakosti:

$$\hbar\omega\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\ ,\ \hbar k\Psi(x,t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t) \tag{24}$$

Ove jednakosti upućuju na to da klasične veličine, količinu gibanja i energiju, moramo zamijeniti s operatorima deriviranja po prostornoj koordinati (tj. položaju) odnosno po vremenu. U klasičnoj mehanici možemo drugi Newtonov zakon za konzervativne sile prikazati kao zakon očuvanja ukupne energije. U taj izraz za ukupnu energiju H za klasičnu količinu gibanja trebamo uvrstiti odgovarajući operator. Dakle, imamo operator ukupne energije, tj. hamiltonijan. Za jednu česticu u polju potencijalne energije $V(x)$ taj operator ima oblik

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{25}$$

Schrödingerova jednadžba

No, operator hamiltonijana zapravo je razmjeran operatoru deriviranja po vremenu, kako je to izrečeno jednadžbom (24). Dakle, "2. Newtonov zakon" za kvant (česticu-val) izražen je jednadžbom:

$$H\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \implies \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{26}$$

Jednadžba (26) zove se **Schrödingerova jednadžba**. Ona je i vremenski i prostorno ovisna. Budući da potencijalna energija najčešće ne ovisi eksplicitno o vremenu, možemo vremenski ovisnu jednadžbu (26) svesti na jednadžbu koja sadrži samo prostorne koordinate. Stavimo

$$\Psi(x,t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x) \tag{27}$$

u jednadžbu (26), i dobit ćemo **stacionarnu Schrödingerovu jednadžbu**:

Schrödingerova jednadžba

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{28}$$

Stacionarna Schrödingerova jednadžba (28) zapravo je **problem vlastitih vrijednosti**. Ta nam jednadžba kaže da je ukupna energija kvanta zapravo vlastita vrijednost operatora ukupne enrgije, hamiltonijana H, te da istodobno uz tu vlastitu vrijednost moramo izračunati i **vlastite funkcije** $\psi(x)$. To je matematički problem koji je jednostavno riješiti samo u nekoliko slučajeva. Pri tome ključnu ulogu imaju **rubni uvjeti** na valnu funkciju $\psi(x)$.

O naravi valne funkcije

Neizbježivo je pitanje **što je valna funkcija, što ona opisuje?**. "Službeni" odgovor na to pitanje dao je Max Born, krajem 20.-tih godina 20. stoljeća. Valna je funkcija $\psi(x)$ zapravo amplituda vjerojatnosti nalaženja "čestice" u okolini točke x. Preciznije rečeno: vjerojatnost $dP(x)$ da se čestica nađe u malom prostornom intervalu dx oko točke x jednaka je:

$$dP(x) = |\psi(x)|^2 \, dx \tag{29}$$

Tumačenje jednadžbe (29) zapravo znači da absolutni kvadrat valne funkcije mora biti normiran na 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 \tag{30}$$

O naravi valne funkcije

U "službenoj" interpretaciji kvantne mehanike dobili smo valove vjerojatnosti. Intuitivno je jasno da samu valnu funkciju ne možemo mjeriti, odnosno da kvantna mehanika sadrži unutarnju "nesigurnost" izraženu vjerojatnošću da se što ostvari, a ne sigurnim predviđanjem da će se baš to i ostvariti. Ne možemo, naprimjer, sa sigurnošću reći u koju će točku na zaslonu pasti jedan elektron u pokusu s dvjema pukotinama, ali možemo sa sigurnošću reći da će mnoštvo elektrona, koji "ne znaju jedan za drugoga", kad prođu kroz sustav od dvije pukotine, makar samo po redu "jedan po jedan", na zaslonu napraviti interferencijsku sliku. Međutim, ako želimo mjerenjem doznati kroz koju pukotinu je elektron prošao (to, naravno, možemo doznati), onda će interferencija nestati. Čin mjerenja položaja elektrona uništava (kolabira) valnu funkciju elektrona, tako da oni doista više "ne znaju jedan za drugoga", te prema tome ne može ni biti nikakve interferencije među njima.

Što mjerimo?

Također je neizbježivo pitanje **što, zapravo, mjerimo ?**. Svaka je klasična veličina nekako zadana s pomoću položaja i količine gibanja. Recimo da imamo klasičnu veličinu $O(x,p)$. Tu ćemo klasičnu veličinu **kvantizirati** tako da klasične veličine zamijenimo s odgovarajućim operatorima. Taj postupak nipošto nije jednoznačan, ali nemojmo se sada na to obazirati. Tako ćemo od klasične veličine napraviti operator. **Srednja vrijednost toga operatora u stanju zadanom s određenom valnom funkcijom** je mjerljiva veličina:

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) O\left(x, i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) dx \tag{31}$$