

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 $D_1 = 5895,9236 \text{ \AA}$ i $D_2 = 5889,9504 \text{ \AA}$.

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:

$$\lambda = b \frac{k^2}{k^2 - n^2} \quad (4.1.1)$$

gde je $n = 2, k = 3, 4, 5 \dots$ i $b = 3645,6 \text{ \AA}$. 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 Angstrom (Anders Jons Ångström, 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, $\nu = c/\lambda$:

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

Tabela 4.2.1 Talasne dužine linija vodonikovog atoma po Balmeru

Oznaka linije	Izračunata talasna d.(Å) (Balmer)	Izmerena talasna d.(Å) (Ångström)	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:

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

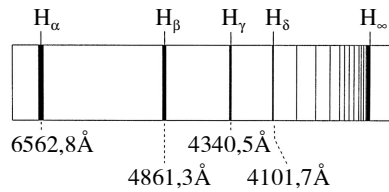
gde je c brzina svetlosti, a n i k proizvoljni celi brojevi, $n < k$. Konstanta R koja iznosi $109677,576 \pm 0,012 \text{ cm}^{-1}$ naziva se Ridbergova konstanta. S obzirom na to da je $\nu/c = \tilde{\nu}$ konačno dobijamo:

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

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 :

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} = T_n - T_k \quad (4.1.5)$$



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:

$$\tilde{\nu} = R \left(1 - \frac{1}{k^2} \right) \quad (4.1.6)$$

$$k = 2, 3, 4, \dots$$

U infracrvenoj oblasti nađene su tri serije:

Pašenova (Paschen), 1908,

$$\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (4.1.7)$$

$$k = 4, 5, 6, \dots$$

Breketova (Bracket), 1922,

$$\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (4.1.8)$$

$$k = 5, 6, 7, \dots$$

Pfundova (Pfund), 1924,

$$\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (4.1.9)$$

$$k = 6, 7, 8, \dots$$

U Tabeli 4.2.2 prikazane su talasne dužine (talasni brojevi) karakterističnih linija iz spektra vodonikovog atoma.

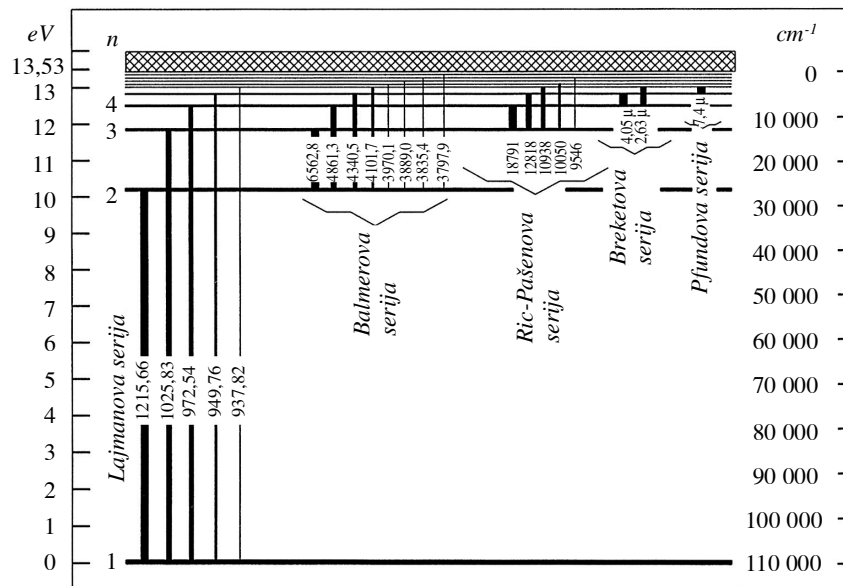
Tabela 4.2.2 Talasne dužine i talasni brojevi prvih nekoliko linija iz različitih serija spektra vodonikovog atoma

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 Angstrom 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 ($3700 \text{ Å} < \lambda < 6700 \text{ Å}$), a Pašenova, Breketova i Pfundova u infracrvenu ($\lambda > 6700 \text{ Å}$). 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 angstromima. (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 ogleada 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:

$$F_q = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \quad (4.2.1)$$

a centrifugalna sila izrazom:

$$F_c = \frac{mv^2}{r} \quad (4.2.2)$$

imamo:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (4.2.3)$$

gde je v periferna brzina elektrona po orbiti radijusa r . Odavde možemo dobiti izraz za kinetičku energiju elektrona, T :

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2r}. \quad (4.2.4)$$

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:

$$A = \int_{\infty}^r F_q dr = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\infty}^r \frac{Ze^2}{r^2} dr = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (4.2.5)$$

$$U = A = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}. \quad (4.2.6)$$

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 :

$$E = U + T \quad (4.2.7)$$

ili s obzirom na to da je [upoređenjem (4.2.4) i (4.2.6)] $U = -2T$:

$$E = -2T + T = -T \quad (4.2.8)$$

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2r}. \quad (4.2.9)$$

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 $\hbar = h/2\pi$: $mvr = n\hbar$, $n = 1, 2, \dots$ 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:

$$1) \quad E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2r};$$

$$2) \quad L = mvr = n\hbar, \quad \hbar = h/2\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots;$$

$$3) \quad E_1, E_2, E_3, \dots \text{ diskretna, stabilna stanja};$$

$$4) \quad \nu = (E_i - E_j)/h.$$

Iz drugog postulata proizlazi:

$$v = \frac{n\hbar}{mr} . \quad (4.2.10)$$

Zamenjujući (4.3.10) u (4.3.4) dobijamo izraz za radijus dopuštenih orbita, r_n :

$$r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{Ze^2 m} \quad (4.2.11)$$

$$n = 1, 2, \dots$$

Za $n = 1$, $r_1 = 0,529\text{\AA}$, pa je:

$$r_n = r_1 \frac{n^2}{Z} . \quad (4.2.12)$$

Radius 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:

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.13)$$

Za vodonik je $Z = 1$ pa sledi:

$$E_n = -13,6 \frac{1}{n^2} \text{eV} \quad (4.2.14)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

4.2.3 Ridbergova konstanta i spektralne serije

Iz četvrtog Borovog postulata neposredno dobijamo da je:

$$\tilde{\nu} = \frac{E_n - E_k}{hc} \quad (4.2.15)$$

odakle zamenom u jednačini (4.2.13) za kvantne brojeve n i k dobijamo:

$$\tilde{\nu}_{nk} = \frac{me^4}{64\pi^3 \epsilon_0^2 c \hbar^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (4.2.16)$$

ili s obzirom na to da je:

$$(4.1.4) \quad \tilde{\nu} = R \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (4.2.17)$$

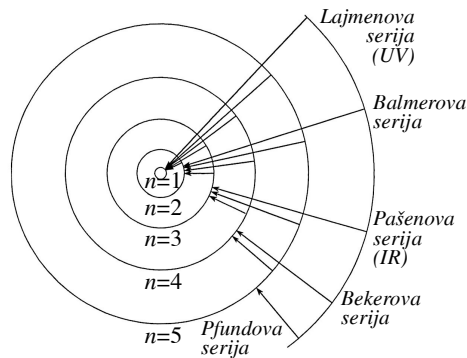
upoređenjem (4.2.16) i (4.2.17) dobijamo Ridbergovu konstantu kao kombinaciju drugih univerzalnih konstanti:

$$R_{\infty} = \frac{me^4}{64\pi^3 \epsilon_0^2 c \hbar^3} \quad (4.2.18a)$$

$$R_{\infty} = \frac{E_0}{hc}. \quad (4.2.18b)$$

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 $R_{\infty} = 1,0973731 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ što je u dobroj saglasnosti sa eksperimentalno dobijenom vrednošću, $R = 1,09677576 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$. 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 utvrđene 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 određenog stanja podrazumeva da se elektron već nalazio u tom stanju.

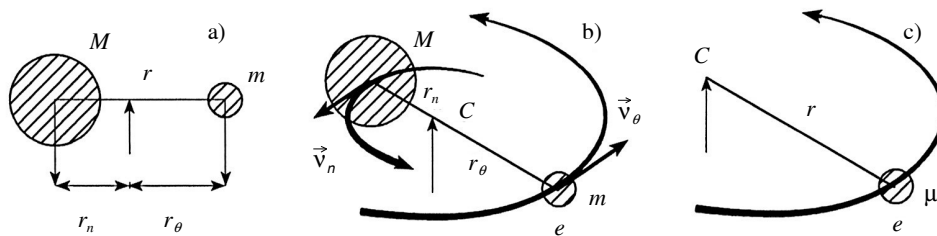


Slika 4.2.1 Šematski prikaz Borovog atomskog modela i porekla spektralnih serija.

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 (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 sa tačkom oslonca, Slika 4.2.2. U takvim uslovima, momenti sile koji deluju na različitim stranama tačke oslonca su jednaki:

$$m_1 r_1 g = m_2 r_2 g \quad (4.2.19)$$

ili:

$$\frac{m_1}{m_2} = \frac{r_2}{r_1}. \quad (4.2.20)$$

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:

$$\frac{m}{M} = \frac{r_n}{r_e} \quad (4.2.21)$$

odakle dobijamo radijuse putanja elektrona i jezgra:

$$r_n = \frac{m}{m + M} r \quad (4.2.22)$$

$$r_e = \frac{M}{m + M} r. \quad (4.2.23)$$

Sada na ovaj sistem primenjujemo drugi Borov postulat:

$$m v r = n \hbar. \quad (4.2.24)$$

Kako imamo dve mase, m i M , koje kruže oko zajedničkog centra perifernim brzinama v_e i v_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:

$$L = L_e + L_n = n \hbar \quad (4.2.25)$$

$$L_e = m v_e r_e = m \omega r_e^2 \quad (4.2.26)$$

$$L_n = M v_n r_n = M \omega r_n^2 \quad (4.2.27)$$

$$L = \omega (m r_e^2 + M r_n^2). \quad (4.2.28)$$

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:

$$L = \omega r^2 \left[m \frac{M^2}{(m + M)^2} + M \frac{m^2}{(m + M)^2} \right]. \quad (4.2.29)$$

Izvlačenjem ispred zagrade proizvoda mM , sabiranjem razlomaka i skraćivanjem dobijamo:

$$L = \omega r^2 \frac{mM}{m+M}. \quad (4.2.30)$$

Uvođenje nove promenljive μ :

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \text{ ili } \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \quad (4.2.31)$$

najzad se dobija:

$$L = \omega r^2 \mu. \quad (4.2.32)$$

Poređenjem ovog izraza sa jednačinom (4.2.28) dobijamo važnu relaciju:

$$\mu r^2 = m r_e^2 + M r_n^2. \quad (4.2.33)$$

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:

$$T = T_e + T_n$$

$$T = \frac{m v_e^2 + M v_n^2}{2} \quad (4.2.34)$$

$$T = \omega \frac{m r_e^2 + M r_n^2}{2}. \quad (4.2.35)$$

Zamenom izraza u brojiocu po relaciji (4.2.33) konačno dobijamo:

$$T = \frac{1}{2} \mu r^2 \omega^2 \quad (4.2.36)$$

što je ekvivalentno izrazu (uz $\omega r = v$) 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 $m \rightarrow \mu$:

$$r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{Ze^2 \mu} \quad (4.2.37)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (4.2.38)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$R_\mu = \frac{\mu e^4}{64\pi^3 \epsilon_0^2 c \hbar^3}. \quad (4.2.39)$$

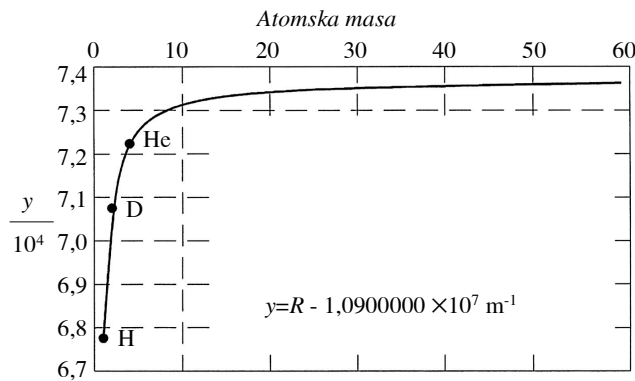
Zato što Ridbergova konstanta zavisi od redukovane mase, jednačina (4.2.39), a ova opet od mase jezgra, jednačina (4.2.31), očigledno je da će konstanta za različite atome vodonikovog tipa biti neznatno različita:

$$\frac{R_\mu}{R_\infty} = \frac{\mu}{m} = \frac{1}{1 + \frac{m}{M}} \quad (4.2.40)$$

ili:

$$R_\mu = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m}{M}}. \quad (4.2.41)$$

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, $R_\mu = 1,0967758 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ sa eksperimentalnom, $R = 1,09677576 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ 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:

$$\frac{M_p}{m_e} = 1836, 15. \quad (4.2.42)$$

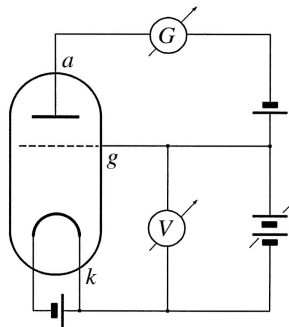
To je, takođe, ohrabrilo istraživače da kvantitativno tumače spektre atoma vodonikovog tipa što je neposredno dovelo do dva značajna rezultata – otkrića deuterijuma, Odeljak 4.4.1, i pravilnog tumačenja spektara zvezda, Odeljak 4.4.2.

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 $h\nu$ prelazeći iz kvantnog stanja više energije E_n u kvantno stanje niže energije E_m (Borov uslov frekvencije):

$$h\nu = E_n - E_m$$



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

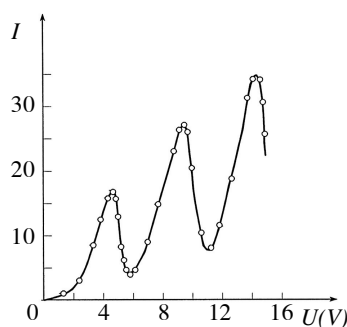
elektroni sa energijom većom ili jednakom od energije usporavajućeg polja između mrežice i anode, u ovom slučaju $0,5 \text{ eV}$. Zavisnost jačine električne struje koja prolazi kroz galvanometar od napona koji je uspostavljen između katode i mrežice ima oblik kao na Slici 4.3.2.

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 prede 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. $4,9 \text{ V}$ ili $9,8 \text{ V}$, zaključujemo da atomi žive u neelastičnim sudarima „preuzimaju” od elektrona energiju koja je prosti umnožak iznosa od $4,9 \text{ eV}$. Apsoorbujući 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 (pobuđivanja) atoma žive, koja se definiše kao razlika energije pobuđenog (kvantnog) stanja i osnovnog stanja u kojem se atomi žive normalno nalaze, iznosi $4,9 \text{ eV}$. 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 $4,9 \text{ V}$, što znači da elektroni sa energijama nižim od $4,9 \text{ eV}$ trpe samo elastične sudare. Pri naponu od $4,9 \text{ V}$ struja opada, jer izvestan broj elektrona gubi svu svoju energiju u neelastičnim sudarima, pa ne može da prede put od rešetke do anode, na kojem vlada usporavajuće polje. Kada je energija elektrona znatno veća od $4,9 \text{ eV}$, tada oni i posle neelastičnog sudara zadržavaju dovoljnu količinu energije da predu 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 $e(V_x - V_E)$, gde je eV_E karakteristična energija koju je elektron predao atomu žive. Potencijalna razlika na preostalom putu do anode je $(V_A - V_x)$, pa se energija elektrona uvećava do vrednosti:

$$e(V_x - V_E) + e(V_A - V_x) = e(V_A - V_E)$$



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.

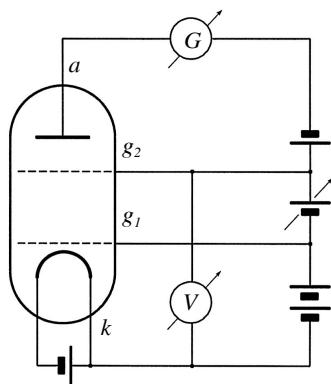
Iz eksperimenta sledi da je vrednost energije od 4,9 eV bitna karakteristika atoma žive i ona predstavlja prvi potencijal pobuđivanja žive ili tačnije energiju potrebnu da atom žive pređe iz osnovnog u prvo pobuđeno kvantno stanje. Prema Borovom postulatu, očekujemo da pobuđeni atom žive posle kratkog vremena (oko 10^{-8} sekundi) pređe u osnovno stanje uz emisiju kvanta energije:

$$E_n - E_m = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 4.9\text{ eV} \Rightarrow \lambda = 2530 \text{ \AA}$$

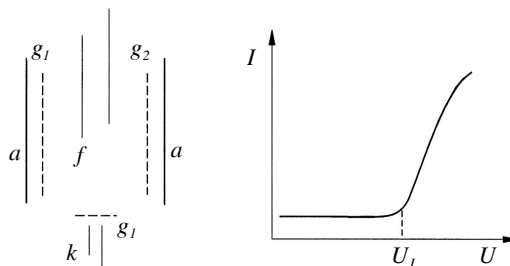
(h je Plankova konstanta, λ talasna dužina, ν frekvencija, a c brzina svetlosti). I ovo očekivanje su potvrdili Frank i Herc koji su spektrografom detektovali zračenje iz cevi talasne dužine 2537 Å a zatim na osnovu ove vrednosti talasne dužine odredili i Plankovu konstantu h .

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 $l \text{ grad}(U)$ [$\text{grad}(U)=dU/dx$]. 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 $l \text{ grad}(U)$ 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 dovoljno 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 stižu na putu između katode k i prve rešetke g_1 , a sudaraju se sa atomima žive u prostoru između g_1 i g_2 .

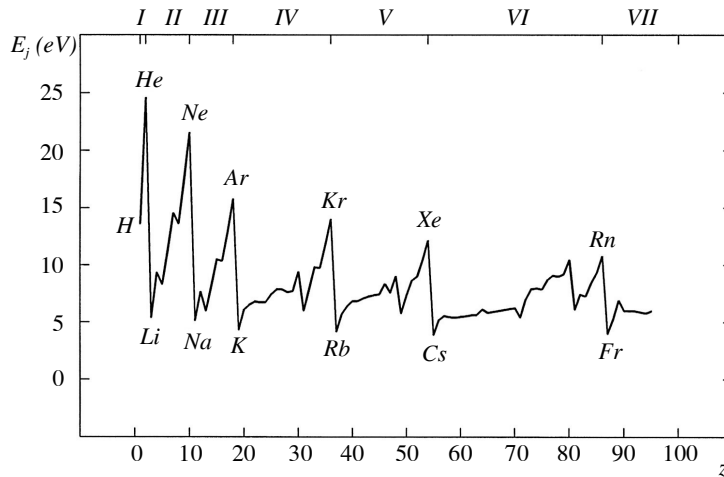


Slika 4.3.4 Aparatura za određivanje potencijala jonizacije; (levo) aparatura je u svemu slična onoj prikazanoj na Slici 4.3.1 osim što sadrži mrežicu g_2 ; (desno) zavisnost termoelektronske struje nastale emisijom elektrona sa vlakna f od ubrzavajućeg napona između katode, k i mrežice g_1 . Sa U_j 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, \dots 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 (atomskeg) 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 prvim 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 najbliži 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 $m/M_p \ll 1$ (m – masa elektrona), jednačina (4.3.42), tačan izraz za redukovanu masu, μ (4.3.31):

$$\mu = \frac{mM}{M+m} = \frac{m}{1 + \frac{m}{M}} \quad (4.4.1a)$$

može se pisati u približnom obliku, kao:

$$\mu \approx m \left(1 - \frac{m}{M} \right) \quad (4.4.1b)$$

[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:

$$\mu_H \approx m \left(1 - \frac{m}{M_p} \right) \quad (4.4.1c)$$

za atom deuterijuma:

$$\mu_D \approx m \left(1 - \frac{m}{2M_p} \right) \quad (4.4.1d)$$

i za atom tricijuma:

$$\mu_T \approx m \left(1 - \frac{m}{3M_p} \right) \quad (4.4.1e)$$

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 vodonika 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.

Potruga 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):

$$r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{Ze^2 m} = r_H \frac{n^2}{Z}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.4.2a)$$

ili:

$$r_1 = \frac{r_H}{Z} \quad (4.4.2b)$$

a da energija vezivanja elektrona (stoga i energija jonizacije) raste sa kvadratom naelektrisanja atomskog jezgra, u jednačini (4.2.13):

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = E_0 \frac{Z^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.4.3a)$$

ili:

$$E_j = E_0 \tilde{Z}^2. \quad (4.4.3b)$$

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^{++} .

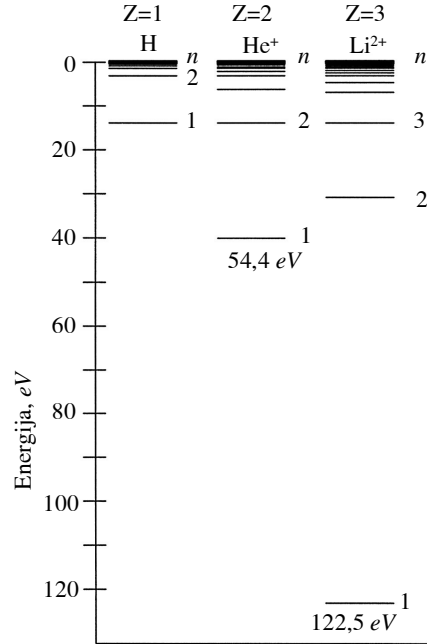
Pored brzog pada energije osnovnog nivoa sa porastom naelektrisanja sa Slike 4.4.1 se može uočiti to da pri nekim vrednostima glavnog kvantnog broja n_H , n_{He^+} i $n_{Li^{++}}$, energije u sva tri sistema, zanemarujući razlike u redukovanim masama, postaju međusobno jednake. Ovo je lako objasniti 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 $Z_H = 1$:

$$n_j = Z_j n_H. \quad (4.4.4)$$

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.



Slika 4.4.1 Energijski nivoi atoma vodonika, H i njemu sličnih jona, jedanput jonizovanog helijuma, He^+ , i dva puta jonizovanog litijuma, Li^{++} .

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):

$$\bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad k = n+1, n+2, \dots \quad (4.4.5a)$$

za jednoelektronske jone možemo pisati u opštem obliku kao:

$$\bar{\nu} = R_j Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad k = n+1, n+2, \dots \quad (4.4.5b)$$

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:

$$\bar{\nu} = R_j \left(\frac{1}{(n/Z)^2} - \frac{1}{(k/Z)^2} \right) \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad k = n+1, n+2, \dots \quad (4.4.5c)$$

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,

$$\bar{\nu} = 4R_{He} \left(1 - \frac{1}{k^2} \right) \quad k=2,3,\dots; \quad (4.4.6a)$$

II Lajmanova,

$$\bar{\nu} = 4R_{He} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad k=3,4,\dots; \quad (4.4.6b)$$

Faulerova,

$$\nu = 4R_{He}\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{k^2}\right) \quad k=4,5,\dots; \quad (4.4.6c)$$

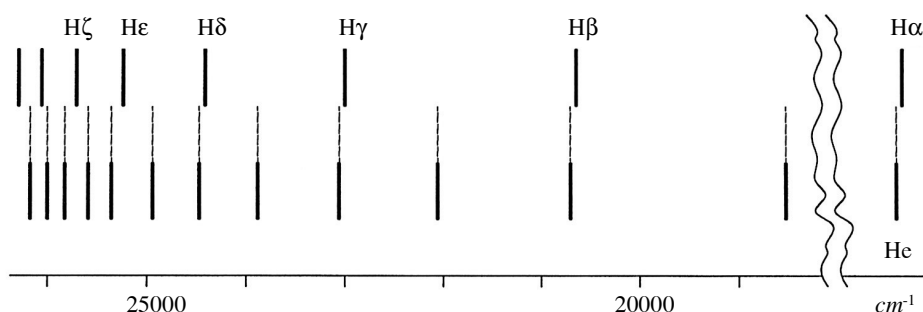
Pikeringova,

$$\nu = 4R_{He}\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{k^2}\right) \quad k=5,6,\dots; \quad (4.4.6d)$$

Ako izraz za Pikeringovu seriju napišemo kao i jednačinu (4.4.5c) (uz $Z^2=4$) imamo:

$$\nu = R_{He}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{(k/2)^2}\right) \quad k=5,6,\dots \quad (4.4.6)$$

Oдавде 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 $v/c \rightarrow 0$. 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. $\Delta E/E_n \rightarrow 0$. Pod takvim uslovima promena energije u odnosu na ukupnu energiju može se smatrati kontinualnom – klasičnom:

$$\lim \frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{dE_n}{E_n} = d(\ln E_n) \rightarrow 0 \quad (4.4.7)$$

odakle zamenom Borovog izraza za energiju elektrona dobijamo:

$$\lim \frac{\Delta E_n}{E_n} = 2 \frac{\Delta n}{n} \rightarrow 0. \quad (4.4.8)$$

S obzirom na to da je minimalna vrednost $\Delta n=1$, 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. $\Delta E/E \rightarrow 0$ sa porastom n .

Prema tome, saglasno principu korespondencije, frekvencija zračenja koje emituje elektron pri prelazu sa nivoa n na nivo k , pri čemu je $n, k \gg |n-k|$ 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, v_n , i radius orbite, r_n :

$$2\pi r_n \nu_{kl} = v_n \quad (4.4.9)$$

$$v_{kl} = \frac{v_n}{2\pi r_n} \quad (4.4.10)$$

$$v_{kl} = \frac{1}{32\pi^3 \epsilon_0^2} \frac{me^4}{n^3 \hbar^3}. \quad (4.4.11)$$

Frekvenciju zračenja po Borovom modelu dobijamo pod uslovom da su kvantni brojevi n i k veliki, tj. $n, k \gg |n-k|$. Tada važi:

$$|n - k| = \Delta n \quad (4.4.12)$$

$$n + k = 2n \quad (4.4.13)$$

$$nk = n^2. \quad (4.4.14)$$

Iz (4.4.12) i (4.4.13) neposredno sledi da je:

$$|n^2 - k^2| = |(n - k)(n + k)| = 2n\Delta n. \quad (4.4.15)$$

Tada se Ridbergova jednačina može pisati u obliku:

$$v_{kv} = v_{kv}c = R_{\infty}c\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right) = R_{\infty}c\frac{k^2 - n^2}{n^2k^2} \quad (4.4.16)$$

odakle se zamenom razlike kvadrata iz brojioca po relaciji (4.4.15) i proizvoda u imeniocu po (4.4.14) dobija:

$$v_{kv} = \frac{R_{\infty}c2n\Delta n}{n^4} = \frac{2R_{\infty}c\Delta n}{n^3}. \quad (4.4.17)$$

Izražavanjem Ridbergove konstantne, R_{∞} , po Borovom modelu, za $\Delta n=1$, dobijamo:

$$v_{kv} = \frac{1}{32\pi^3 \epsilon_0^2} \frac{me^4}{n^3 \hbar^3} \quad (4.4.18)$$

odnosno:

$$v_{kl} = v_{kv}. \quad (4.4.19)$$

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{v} , dat je izrazom:

$$\vec{p} = m\vec{v}. \quad (\text{D-4.6.1})$$

Krivolinijsko kretanje može se razložiti na kružno i pravolinijsko razlaganjem brzine na radijalnu i tangencijalnu:

$$\vec{p} = m(\vec{v}_r + \vec{v}_t).$$

Množenjem vektorski sleva radijusom krivine, \vec{r} , dobijamo:

$$\vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times m\vec{v}_r + \vec{r} \times m\vec{v}_t.$$

Pošto je $\vec{r} \parallel \vec{v}_r$, to je i proizvod ta dva vektora jednak nuli, pa je:

$$\vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times m\vec{v}_t.$$

Vektor $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times m\vec{v}_t$ naziva se moment impulsa (ili ugaoni moment). S obzirom na to da je \vec{v}_t normalno na \vec{r} apsolutna vrednost njihovog proizvoda jednaka je proizvodu njihovih apsolutnih vrednosti pa konačno imamo:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = rm\vec{v}_t\vec{n} \quad (\text{D-4.6.2})$$

gde je \vec{n} jedinični vektor normalan na ravan u kojoj se telo kreće. Tangencijalna brzina, \vec{v}_t , može se izraziti preko ugaone brzine ω jednostavnom relacijom $v_t = r \cdot \omega$, ($v_t = ds/dt$ a $ds/r = d\theta$ pa je s obzirom na $ds = r \cdot d\theta$, $v_t = r \cdot d\theta/dt = r \cdot \omega$), tako da na kraju iz (D-4.6.2) dobijamo vrednost ugaonog momenta:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = mr^2\omega\vec{n} \quad (\text{D-4.6.3a})$$

ili u skalarnom obliku:

$$L = mr^2\omega. \quad (\text{D-4.6.3b})$$

Diferenciranjem izraza (D-4.6.3a) dobijamo:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{d(\vec{r} \times m\vec{v})}{dt} = \dot{\vec{r}} \times \vec{v} + \vec{r} \times m\dot{\vec{v}}.$$

S obzirom na to da je $\dot{\vec{r}} = \vec{v}$ imamo da je $\dot{\vec{r}} \times \vec{v} = 0$ odakle sledi $\dot{\vec{r}}$:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{r} \times m\dot{\vec{v}}. \quad (\text{D-4.6.4})$$

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):

$$\vec{M} = \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{r} \times m\dot{\vec{v}} \quad (\text{D-4.6.5})$$

ili s obzirom na to da je $\vec{a} = \dot{\vec{v}}$:

$$\vec{M} = \vec{r} \times m\vec{a} = \vec{r} \times \vec{F} \quad (\text{D-4.6.6})$$

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:

$$L = \text{const.} \quad (\text{D-4.6.7})$$

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:

$$x = r \cos \varphi \quad (\text{D-4.6.8})$$

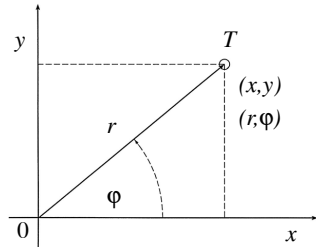
$$y = r \sin \varphi.$$

Kinetička energija u Dekartovim koordinatama izražava se u obliku:

$$T = T_x + T_y \quad (\text{D-4.6.9a})$$

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2). \quad (\text{D-4.6.9b})$$

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:

$$\dot{x} = \dot{r} \cos \varphi - r \sin \varphi \dot{\varphi} \quad (\text{D-4.6.10})$$

$$\dot{y} = \dot{r} \sin \varphi + r \cos \varphi \dot{\varphi}.$$

Zamenom (D-4.6.10) u (D-4.6.9b) dobijamo izraz za kinetičku energiju izraženu u polarnim koordinatama:

$$T = \frac{1}{2} m \{ [\dot{r} \cos \varphi - (r \sin \varphi) \dot{\varphi}]^2 + [\dot{r} \sin \varphi + (r \cos \varphi) \dot{\varphi}]^2 \}$$

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2). \quad (\text{D-4.6.11})$$

Treba uočiti to da dve komponente kinetičke energije mogu da se pridruže radijalnom i tangencijalnom kretanju, tj.:

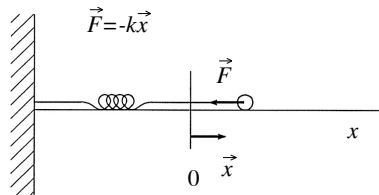
$$T = T_r + T_t. \quad (\text{D-4.6.12})$$

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:

$$\vec{F} = -k\vec{x} \quad (\text{D-4.6.13})$$

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):

$$\vec{F} = m\vec{a} = -k\vec{x}. \quad (\text{D-4.6.14})$$

Prelaskom u skalarni oblik (s obzirom na to da su \vec{a} i \vec{x} paralelni) uz $a = dv/dt = \dot{v} = \ddot{x} = d^2x/dt^2$ dobijamo:

$$m\ddot{x} + kx = 0 \quad (\text{D-4.6.15})$$

$$\ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0.$$

Ovo je linearna diferencijalna jednačina drugog reda koju smo rešavali u odeljku D-2.2.4 a čije opšte rešenje ima oblik:

$$x = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t) \quad (\text{D-4.6.16})$$

uz:

$$\omega^2 = \frac{k}{m}. \quad (\text{D-4.6.17})$$

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 $t = 0$ $dx/dt = 0$. Tada je:

$$x_0 = A \sin 0 + B \cos 0 = B$$

$$\dot{x} = A\omega \cos(\omega t) - B\omega \sin(\omega t)$$

$$\dot{x}(0) = A\omega \cos 0 - B\omega \sin 0 = 0 \Rightarrow$$

$$A = 0$$

i konačno:

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t). \quad (\text{D-4.6.18})$$

Impuls p_x :

$$p_x = m\dot{x} = -mx_0\omega \sin^2(\omega t). \quad (\text{D-4.6.19})$$

Kinetička energija, T :

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p_x^2}{2m} = \frac{1}{2}mx_0^2 \omega^2 \sin^2(\omega t). \quad (\text{D-4.6.20})$$

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:

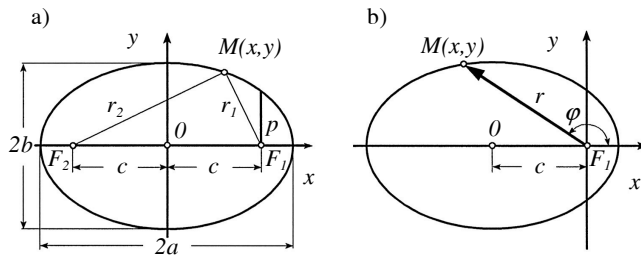
$$U = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \cos^2(\omega t). \quad (\text{D-4.6.21})$$

Ukupna energija, E :

$$E = U + T = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 [\cos^2(\omega t) + \sin^2(\omega t)] \quad (\text{D-4.6.22})$$

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2.$$

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:

$$r_1 + r_2 = 2a. \quad (\text{D-4.6.23})$$

Svako od fokalnih rastojanja F_1 i F_2 (fokalni radijus vektor tačke elipse s apscisom x) izražava se formulom:

$$r_1 = a - \epsilon x \quad (\text{D-4.6.24})$$

$$r_2 = a + \epsilon x$$

gde je a velika poluosa elipse, ϵ njen ekscentritet:

$$\epsilon^2 = 1 - \frac{b^2}{a^2} < 1 \quad (\text{D-4.6.25})$$

i b mala poluosa elipse. Iz poslednjeg izraza nalazimo odnos male i velike poluose:

$$\frac{b}{a} = \sqrt{1 - \epsilon^2}. \quad (\text{D-4.6.26})$$

Fokusi elipse, F_1 i F_2 , leže na velikoj osi elipse s obe strane centra, O , na rastojanju c :

$$c = \sqrt{a^2 - b^2}. \quad (\text{D-4.6.27})$$

Fokalni parametar, p , predstavlja polovinu tetive koja prolazi kroz jedan fokus a koja je paralelna sa malom poluosom:

$$p = \frac{b^2}{a}. \quad (\text{D-4.6.28})$$

Kada se ose elipse poklapaju sa koordinatnim osama tada je kanonička jednačina elipse oblika:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1. \quad (\text{D-4.6.29})$$

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:

$$\frac{(x+c)^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (\text{D-4.6.30a})$$

ili s obzirom na to da je:

$$\frac{c}{a} = \epsilon \quad (\text{D-4.6.30b})$$

$$\left(\frac{x}{a} + \epsilon\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 = 1.$$

Odnos među koordinatama (x, y) i (r, φ) je isti kao ranije, jednačine (D-4.6.8). Uočimo li da je:

$$a = \frac{p}{1 - \epsilon^2} \quad (\text{D-4.6.31})$$

$$b^2 = \frac{p^2}{1 - \epsilon^2} \quad (\text{D-4.6.32})$$

transformacijom koordinata prema jednačinama (D-4.6.8) nalazimo:

$$\frac{x}{a} = \frac{r}{p}(1 - \epsilon^2) \cos \varphi; \quad \frac{y}{b} = \frac{r}{p} \sqrt{1 - \epsilon^2} \sin \varphi.$$

Zamenom ovih odnosa u jednačinu (D-4.6.30b) dobijamo kvadratnu jednačinu po r čija su rešenja:

$$r_{1/2} = \frac{p(-\epsilon \cos \varphi \pm 1)}{1 - \epsilon^2 \cos^2 \varphi}.$$

S obzirom na to da r mora biti pozitivno uzimamo rešenje sa pozitivnim znakom pa dobijamo:

$$r = \frac{p(1 - \epsilon \cos \varphi)}{(1 + \epsilon \cos \varphi)(1 - \epsilon \cos \varphi)} \quad (\text{D-4.6.33a})$$

$$r = \frac{p}{1 + \epsilon \cos \varphi}.$$

Najzad, oslobodimo li se fokalnog parametra pomoću izraza (D-4.6.31) nalazimo da je jednačina ellipse u polarnim koordinatama:

$$r = \frac{a(1 - \epsilon^2)}{1 + \epsilon \cos \varphi}. \quad (\text{D-4.6.33b})$$

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 $\lambda = 4686\text{\AA}$ (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.:

$$\oint p_k dq_k = n_k h. \quad (4.6.1)$$

Za ilustraciju razmotrićemo jednodimenzioni harmonijski oscilator za koji su generalisana koordinata i impuls $x = x_0 \cdot \cos(\omega t)$ i $p_x = -m x_0 \omega \cdot \sin(\omega t)$, respektivno. Primenom uslova za kvantovanje integrala dejstva dobijamo:

$$\begin{aligned} nh &= \int_0^T p_x dx = \int_0^T m x_0^2 \omega^2 \sin^2(\omega t) dt = m \omega x_0^2 \int_0^T \sin^2(\omega t) d(\omega t) = \\ &= m \omega x_0^2 \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta d\theta \Rightarrow nh = m \omega \pi x_0^2. \end{aligned} \quad (4.6.2)$$

Prema tome, dobijamo da su amplitude oscilovanja kvantovane:

$$x_0^2 = \frac{nh}{\pi m \omega} \quad (4.6.3)$$

kao i energijska stanja:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 = n \omega \hbar = nh\nu \\ n &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (4.6.4)$$

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 frekvenciju (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:

$$E(n_x, n_y) = \hbar(n_x\omega_x + n_y\omega_y). \quad (4.6.5a)$$

Ako je oscilator izotropan, tj. $k_x = k_y$ tada je $\omega_x = \omega_y = \omega$

$$i: \quad E_n = n\hbar\omega \quad (4.6.5b)$$

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 $E_n = n \cdot \hbar\omega = n \cdot \hbar\omega$, 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 . Stepenu degeneracije energijskog stanja, E_n , 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 ($n_x = 0, 1, 2, \dots, n_2$) 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 zavisao 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 $n_z = 1$ 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 $n_x = n_y = n_z$ 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:

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}. \quad (4.6.6)$$

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:

$$E = T + U$$

$$(D-4.6.11) \quad T = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2)$$

$$E = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (4.6.7)$$

i:

$$L = mr^2\dot{\varphi}. \quad (4.6.8)$$

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:

$$\dot{\varphi} = \frac{\dot{L}}{mr^2} \quad (4.6.9)$$

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:

$$\dot{r} = \frac{dr}{d\varphi} \frac{L}{mr^2}. \quad (4.6.10)$$

Eliminisanjem izvoda po vremenu u izrazu za ukupnu energiju E zamenom (4.6.9) i (4.6.10) u (4.6.7) neposredno dobijamo:

$$\frac{m}{2} \left[\left(\frac{dr}{d\varphi} \right)^2 \frac{L^2}{m^2 r^4} + r^2 \frac{L^2}{m^2 r^4} \right] = E + \frac{l}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

i nakon sređivanja:

$$\frac{1}{r^4} \left(\frac{dr}{d\varphi} \right)^2 \frac{L^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} = E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (4.6.11)$$

Uvođenjem nove promenljive, ρ :

$$\rho = \frac{1}{r} \quad (4.6.12)$$

uz:

$$\frac{d\rho}{d\varphi} = \frac{d(1/r)}{d\varphi} = -\frac{1}{r^2} \frac{dr}{d\varphi} \quad (4.6.13)$$

dobijamo istu jednačinu u nešto pogodnijem obliku:

$$\left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right)^2 \frac{L^2}{2m} + \frac{L^2}{2m} \rho^2 = E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Ze^2 \rho. \quad (4.6.14)$$

Ova diferencijalna jednačina može se rešiti neposrednim integraljenjem nakon razdvajanja promenljivih. Međutim, ako je još jedanput diferenciramo možemo je svesti na posebno pogodan oblik:

$$\frac{d\rho}{d\varphi} \left[\frac{d^2 \rho}{d\varphi^2} \frac{L^2}{m} + \frac{L^2}{m} \rho - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Ze^2 \right] = 0. \quad (4.6.15)$$

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:

$$\frac{d^2 \rho}{d\varphi^2} + \rho = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{mZe^2}{L^2}. \quad (4.6.16)$$

Ovo je nehomogena diferencijalna jednačina drugog reda. Njena rešenja se dobijaju sabiranjem opšteg rešenja iz nje izvedene homogene jednačine:

$$\frac{d^2 \rho}{d\varphi^2} + \rho = 0 \quad (4.6.17)$$

i partikularnog rešenja nehomogene jednačine. Očigledno je to, da je jedno rešenje nehomogene jednačine (4.6.16):

$$\rho_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{mZe^2}{L^2}. \quad (4.6.18)$$

Opšte rešenje homogene jednačine, kao što smo videli kod harmonijskog oscilatora (D-4.6.16) je:

$$\rho_2 = A \cos \varphi + B \sin \varphi \quad (4.6.19)$$

A i B su konstante koje treba odrediti iz početnih uslova. Tako se opšte rešenje dobija u obliku:

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 \quad (4.6.20)$$

$$\rho = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{mZe^2}{L^2} + A \cos \varphi + B \sin \varphi. \quad (4.6.21)$$

Recimo da su početni uslovi zadati tako da je $\varphi = 0$ za minimalno r (tj. maksimalno ρ):

$$za \varphi = 0 \quad \frac{d\rho}{d\varphi} = 0 \quad \frac{d^2\rho}{d\varphi^2} < 0.$$

Izračunavanjem prvog i drugog izvoda iz opšteg rešenja dobijamo da je $B=0$ i $A>0$ pa je rešenje oblika:

$$\rho = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{mZe^2}{L^2} + A \cos \varphi \quad (4.6.22)$$

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:

$$(D-4.6.33a) \quad r = \frac{a(1 - \epsilon^2)}{1 + \epsilon \cos \varphi} \quad (4.6.23)$$

ili uzimanjem recipročne vrednosti:

$$\rho = \frac{1}{r} = \frac{1}{a(1 - \epsilon^2)} + \frac{\epsilon}{a(1 - \epsilon^2)} \cos \varphi \quad (4.6.24)$$

uočava se značajna sličnost. Pri tome je kod elipse ϵ –ekscentricitet, a –velika poluosa i b – mala poluosa, pri čemu važi:

$$\epsilon^2 = 1 - \frac{b^2}{a^2} \quad (4.6.25)$$

$$\frac{b}{a} = \sqrt{1 - \epsilon^2}. \quad (4.6.26)$$

(Ne mešati ekscentricitet ϵ , sa dielektričnom konstantom, ϵ_0 !!!). Na osnovu sličnosti našeg rešenja [jednačina (4.6.22)] i jednačine elipse (4.6.24), sledi:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{mZe^2}{L^2} = \frac{1}{a(1 - \epsilon^2)} \quad (4.6.27)$$

i:

$$A = \frac{\epsilon}{a(1 - \epsilon^2)}. \quad (4.6.28)$$

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):

$$\frac{d\rho}{d\varphi} = -A \sin \varphi \quad \left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right)^2 = A^2 \sin^2 \varphi$$

i zamenimo ga u jednačini (4.6.14), nakon sređivanja dobijamo:

$$A = \sqrt{\frac{2mE}{L^2} + \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \left(\frac{mZe^2}{L^2}\right)^2}. \quad (4.6.29)$$

Uvrštavanjem (4.6.29) u (4.6.28) dobijamo:

$$A = \sqrt{\frac{2mE}{L^2} + \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \left(\frac{mZe^2}{L^2}\right)^2} = \frac{\epsilon}{a(1 - \epsilon^2)}. \quad (4.6.30)$$

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:

$$1 - \epsilon^2 = -(4\pi\epsilon_0)^2 \frac{2EL^2}{mZ^2e^4} \quad (4.6.31)$$

a zamenom (4.6.31) u (4.6.30):

$$a = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2E}. \quad (4.6.32)$$

Najzad, zamenom (4.6.31) i (4.6.32) u (4.6.25):

$$b = \frac{L}{\sqrt{-2mE}}. \quad (4.6.33)$$

4.6.3 Bor-Zomerfeldovo kvantovanje

Energiju elektrona u eliptičnoj putanji neposredno dobijamo iz jednačine (4.6.32):

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2a}. \quad (4.6.34)$$

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:

$$\oint p_r dr = n_r h \quad \oint p_\varphi d\varphi = n_\varphi h. \quad (4.6.35)$$

Pri tome su p_r i p_φ impulsi pridruženi koordinatama r i φ , tj. radijalni i tangencijalni impuls ($p_\varphi = L$):

$$p_r = m\dot{r} \quad p_\varphi = mr^2\dot{\varphi}. \quad (4.6.36)$$

Za kretanje u polju centralne sile $p_\varphi = L = \text{const.}$ te se iz integrala dejstva neposredno dobija:

$$n_\varphi h = \oint p_\varphi d\varphi = p_\varphi \oint d\varphi = p_\varphi \varphi \Big|_0^{2\pi} = 2\pi p_\varphi \Rightarrow \quad (4.6.37)$$

$$p_\varphi = L = n_\varphi \frac{h}{2\pi} = n_\varphi \hbar \quad (4.6.38)$$

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:

$$1 - \epsilon^2 = \frac{n_\varphi^2}{(n_r + n_\varphi)^2} \quad (4.6.39)$$

ili s obzirom na jednačinu (4.6.26):

$$\frac{b}{a} = \frac{n_\varphi}{n_r + n_\varphi}. \quad (4.6.40)$$

Zbir dva kvantna broja n_r i n_φ naziva se glavni kvantni broj, n :

$$n = n_r + n_\varphi \quad (4.6.41)$$

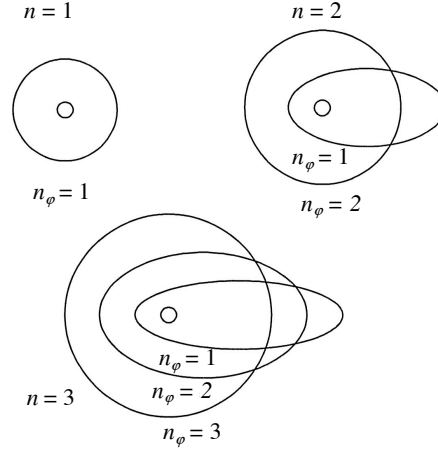
pa je:

$$\frac{b}{a} = \frac{n_\varphi}{n}. \quad (4.6.42)$$

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)]:

$$E = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{mZ^2 e^4}{2n^2 \hbar^2}. \quad (4.6.43)$$

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-Zommerfeldovom modelu. Kada je $n_\phi = n$ orbite su kružnog oblika. Za $n_\phi < n$ 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 $b/a = n_\phi/n$ (4.6.42) i kako je $b < a$ sledi da je $(n_\phi)_{\max} = n$. Isto tako, $b > 0$ tj. $n_\phi > 0$ odakle proizlazi da se azimutalni kvantni broj, za dato n kreće od 1 do n : $n_\phi = 1, 2, 3, \dots, n$. Zbog toga je svako stanje sa glavnim kvantnim brojem n , n -tostruko degenerisano. Za $n_\phi < n$ orbite su eliptičnog oblika, dok za $n_\phi = n$ dobijamo kružne orbite, kao što je prikazano na Slici 4.6.1.

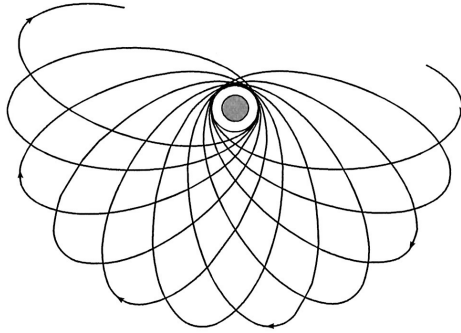
Energija elektrona, bez obzira na oblik orbite, zavisi samo od glavnog kvantnog broja, n , tj. orbite sa različitim ekscentricitetom su degenerisane. Na ovom mestu Zommerfeld je uveo relativističku korekciju za masu elektrona. Za orbitu sa velikim ekscentricitetom elektron prolazi pored jezgra veoma 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:

$$E_n = \frac{E_0 Z^2}{n^2} \left[1 + \frac{a^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{n_\phi} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (4.6.44a)$$

gde je E_0 energija elektrona u prvoj Borovoj orbiti H atoma a α **konsanta fine strukture**:

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 c \hbar} e^2 = 7,297 \times 10^{-3} \approx \frac{1}{137}. \quad (4.6.44b)$$

Ova konstanta je ime dobila otuda što je (numerički) ispravno objasnila fino cepanje linija vodonikovog spektra.



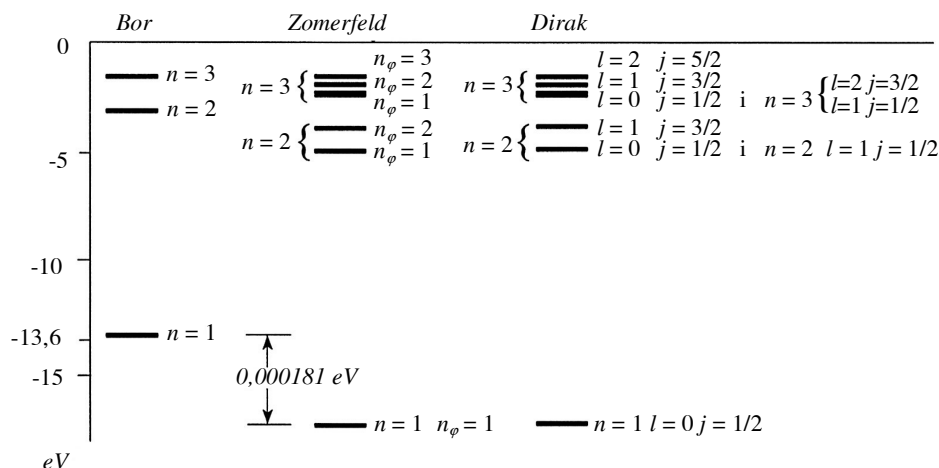
Slika 4.6.2 Zbog relativističke promene mase pri kretanju u blizini atomskog jezgra dolazi do promene oblika elektronske orbite. Pored rotacije elektrona po eliptičnoj orbiti, dolazi i do rotacije orbite oko njene žiže. Rotaciona frekvencija orbite, za dati glavni kvantni broj, n , zavisi od ekscentriciteta 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 ekscentriciteta 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 obzirom na to da se energija stanja znatno manje menja sa promenom kvantnog broja 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 ($j=l+s$, $l=n_\phi-1$, s – spinski kvantni broj, videti odeljak 4.8):

$$E_n = -\frac{E_0 Z^2}{n^2} \left[1 + \frac{a^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (4.6.44c)$$

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 uklanjanja 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 uzrokovano 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 $p_\psi = \text{const.}$ služeći se istim argumentima kao i kod p_ϕ . Naime, pošto je $L = \text{const.}$, 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:

$$\cos \alpha = \frac{p_\psi}{L} = \frac{m\hbar}{n_\psi \hbar} = \frac{m}{n_\psi}. \quad (4.6.49)$$

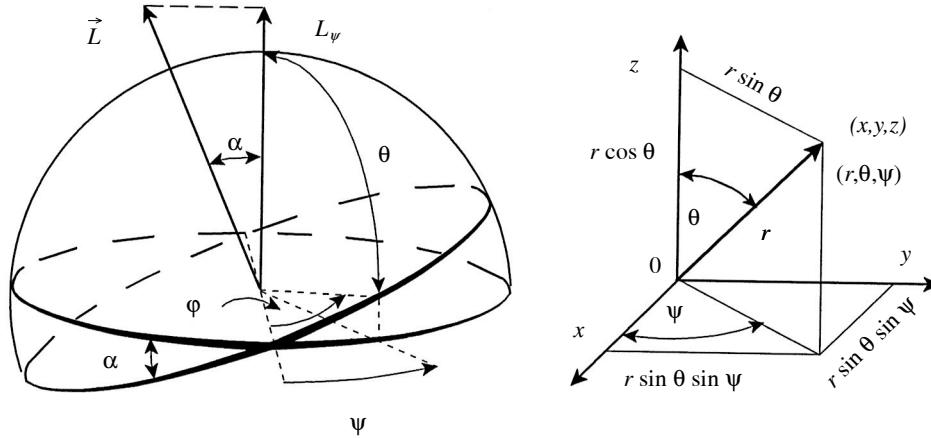
Drugim rečima, projekcija momenta impulsa (ugaonog momenta) je kvantovana i određena magnetnim kvantnim brojem, m , koji može imati vrednosti od n_ψ do $-n_\psi$:

$$p_{proj.} = m\hbar. \quad (4.6.50)$$

Neka je, na primer: $L = 1 \cdot \hbar$; tada je $n_\psi = 1$

$$\cos \alpha = \frac{m}{n_\psi} = +1, 0, -1.$$

Prema tome, pri $n_\psi = 1$ moguće su samo tri orijentacije orbite; pri $n = 2$ imamo pet takvih orijentacija ($m = 2, 1, 0, -1, -2$) ili uopšte za $n_\psi = k$ 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 :

$$n_\phi = n_\theta + n_\psi. \quad (4.6.51)$$

Sa Slike 4.6.5 se vidi da između uglova θ , ϕ i ψ postoji veza:

$$(rd\varphi)^2 = (r\sin\theta d\psi)^2 + (rd\theta)^2. \quad (4.6.52)$$

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:

$$mr^2 \dot{\varphi} d\varphi = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\psi} d\psi + mr^2 \dot{\theta} d\theta. \quad (4.6.53)$$

Integraljenjem izraza (4.6.53) po sferi dobijamo:

$$\oint mr^2 \dot{\varphi} d\varphi = \oint mr^2 \sin^2 \theta \dot{\psi} d\psi + \oint mr^2 \dot{\theta} d\theta. \quad (4.6.54)$$

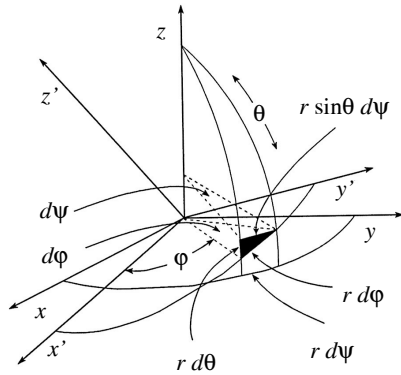
Odavde, poređenjem sa kvantnim uslovima:

$$\oint p_\varphi d\varphi = n_\varphi h, \quad \oint p_\theta d\theta = n_\theta h, \quad \oint p_\psi d\psi = n_\psi h$$

neposredno dobijamo:

$$n_\varphi = n_\psi + n_\theta. \quad (4.6.55)$$

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 :

$$n = n_r + n_\varphi = n_r + n_\psi + n_\theta$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

azimutni kvantni broj, n_φ :

$$\begin{aligned} n_\varphi &= n_\psi + n_\theta, \\ n_\varphi &= 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

magnetni kvantni broj, m :

$$\begin{aligned} m &= n_\varphi \cos \alpha \\ m &= -n_\varphi, \dots, -1, 0, 1, \dots, n_\varphi. \end{aligned}$$

Pomoću njih se izražavaju parametri elektronskih orbita:
velika osa eliptične putanje, a :

$$a = \frac{a_0 n^2}{Z} \quad (4.6.56)$$

a_0 – radijus prve Borove orbite H atoma,
mala osa eliptične putanje, b :

$$b = \frac{a_0 n_\varphi}{n} = \frac{n_\varphi n a_0}{Z} \quad (4.6.57)$$

energija elektrona, E_n :

$$E_n = -\frac{Z^2 E_0}{n^2}. \quad (4.6.58)$$

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):

$$\cos \alpha = \frac{m}{n_\varphi}. \quad (4.6.59)$$

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 ($n_\varphi = 1, 2, \dots, n$). 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 ($L = \text{const.}$). 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 ($n = 1, n_\varphi = 1 \rightarrow n \geq 2, n_\varphi = 2$). Svaka linija Balmerove serije nastaje kombinovanjem tri vrste termova ($n = 2, n_\varphi = 1 \rightarrow n \geq 3, n_\varphi = 2$; $n = 2, n_\varphi = 2 \rightarrow n \geq 3, n_\varphi = 1$ i $n = 2, n_\varphi = 2 \rightarrow n \geq 3, n_\varphi = 3$), 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, $m_0 = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$;

– jedinica energije – energija mase mirovanja elektrona, $m_0 c^2$

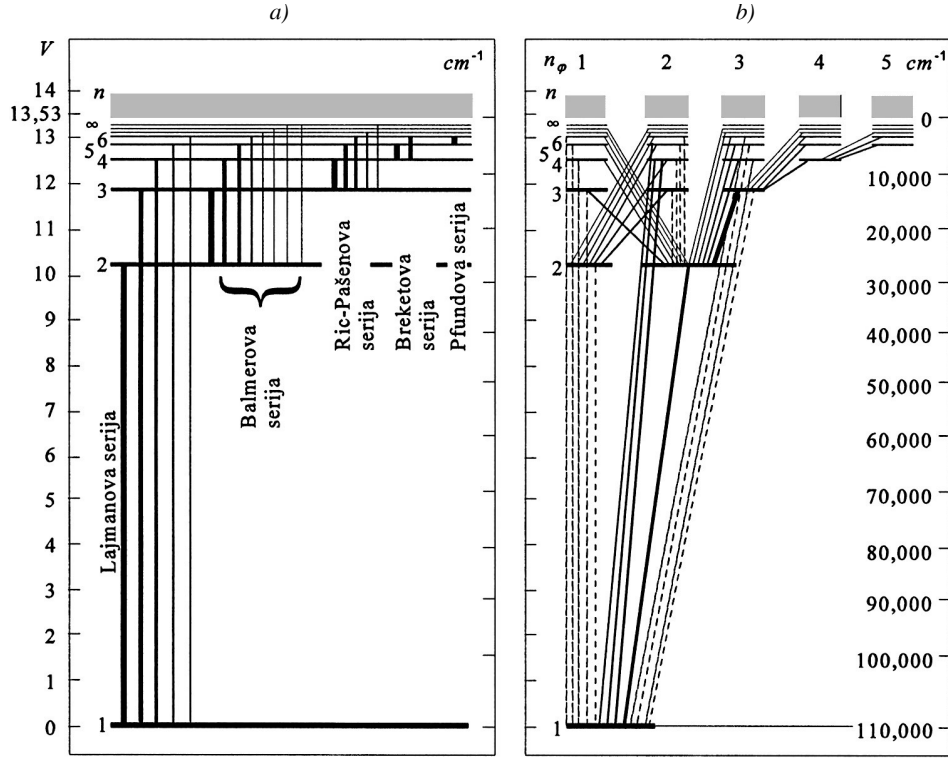
$m_0 c^2 = 0,511 \text{ MeV}$;

– jedinica dužine – Komptonova talasna dužina elektrona λ_c podeljena sa 2π , (odjeljak 7.3):

$$\frac{\lambda_c}{2\pi} = \frac{\hbar}{m_0 c} = 3,86 \times 10^{-13} \text{ m}$$

– 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-Zommerfeldov model. Punim linijama prikazani su dozvoljeni a isprekidanim linijama zabranjeni prelazi za Lajmanovu i Balmerovu seriju. Treba uočiti da su prelazi mogući samo za $\Delta n_\phi = \pm 1$.

i:

– jedinica naelektrisanja – naelektrisanje elektrona, $e = 1,6 \times 10^{-19} \text{C}$.

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 (jedinničnom) rastojanju, \hbar/m_0c :

$$(E_{el})_{el} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\frac{\hbar}{m_0c}}.$$

Ocenu veličine ove interakcije dobijamo izražavajući je u prirodnim jedinicama za energiju, m_0c^2 :

$$\frac{(E_{el})_{el}}{m_0c^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\frac{\hbar}{m_0c} m_0c^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c}.$$

Uporedimo li dobijeni izraz sa jednačinom (4.6.44b) kojom je definisana konstanta fine strukture, α , vidimo da je:

$$\alpha = \frac{(E_{el})_{el}}{m_0 c^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (\text{P-4.6.1.1})$$

iz dobijenog odnosa možemo izvući dva korisna zaključka. Prvo, konstantu fine strukture, α :

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} = 7,29735308(33) \times 10^{-3}$$

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:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \alpha \hbar c.$$

Zamenom ovog odnosa u izraz za Borov atomski radijus:

$$(4.3.11) \quad r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{Ze^2 m} n^2$$

dobijamo:

$$r_n = \frac{\hbar}{m_0 c \alpha} \frac{1}{Z} \frac{n^2}{2\pi\alpha} = \frac{\lambda_c}{2\pi\alpha} \frac{n^2}{Z} \quad (\text{P-4.6.2.1})$$

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:

$$(4.3.10) \quad v_n = \frac{n\hbar}{m_0 r}.$$

Zamenom radijusa iz prethodnog zadatka nalazimo:

$$v_n = \alpha c \frac{Z}{n} \quad (\text{P-4.6.3.1})$$

odakle za prvu Borovu orbitu atoma vodonika ($Z = 1, n = 1$) dobijamo:

$$v_0 = \alpha c \approx \frac{c}{137}. \quad (\text{P-4.6.3.2})$$

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:

$$(4.3.13) \quad E = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}.$$

Kvadriranjem izraza za konstantu fine strukture (P-4.6.1.1) i preuređivanjem dobijamo:

$$\alpha^2 c^2 = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{e^2}{\hbar^2}$$

što zamenom u jednačinu za energiju daje:

$$E = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\frac{Z^2}{n^2}. \quad (\text{P-4.6.4.1})$$

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:

$$R_H = \frac{1}{4\pi r_0} \alpha = \frac{1}{2\lambda_c} \alpha^2.$$

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 najsajnijim 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:

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(1+s)^2} - \frac{R}{(k+p)^2} \quad (4.7.1)$$

$$k = 2, 3, 4, \dots$$

II sporedna, oštra (sharp):

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(2+p)^2} - \frac{R}{(k+s)^2} \quad (4.7.2)$$

$$k = 2, 3, 4, \dots$$

I sporedna, difuzna (diffuse):

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(2+p)^2} - \frac{R}{(k+d)^2} \quad (4.7.3)$$

$$k = 3, 4, 5, \dots$$

Bergmanova, fundamentalna (fundamental):

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(3+d)^2} - \frac{R}{(k+f)^2} \quad (4.7.4)$$

$$k = 4, 5, 6, \dots$$

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:

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{k^2} \right) = \frac{R}{1^2} - \frac{R}{k^2} \quad (4.7.5)$$

Balmerova:

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{k^2} \right) = \frac{R}{2^2} - \frac{R}{k^2} \quad (4.7.6)$$

Pašenova:

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{k^2} \right) = \frac{R}{3^2} - \frac{R}{k^2} \quad (4.7.7)$$

Breketova:

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{k^2} \right) = \frac{R}{4^2} - \frac{R}{k^2} \quad (4.7.8)$$

Pfundova:

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{k^2} \right) = \frac{R}{5^2} - \frac{R}{k^2} \quad (4.7.9)$$

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:

$$(4.4.3a) \quad E = -\frac{hcRZ^2}{n^2} \quad (4.7.10)$$

energija elektrona kod alkalnih metala data izrazom:

$$E = -\frac{hcRZ_{eff}^2}{n^2}. \quad (4.7.11)$$

Z_{eff} je efektivno naelektrisanje:

$$Z_{eff} = Z - \sigma_{n, n_\phi} \quad (4.7.12)$$

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.:

$$\sigma_{n, n_\phi} = Z - 1. \quad (4.7.13)$$

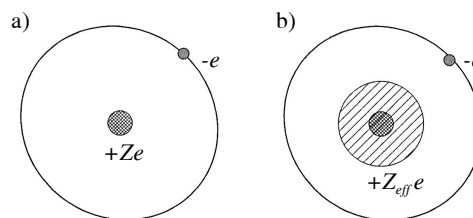
Međutim, zbog prodiranja optičkog elektrona u unutrašnjost elektronskog oblaka, Slika 4.7.2, imamo da je:

$$\sigma_{n, n_\phi} < Z - 1 \quad (4.7.14)$$

tj. efektivno naelektrisanje je veće od 1.

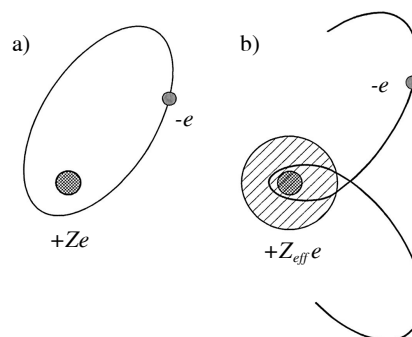
Kako smo već videli, svakom energijskom nivou u vodonikovom atomu odgovara više eliptičnih putanja različitog ekscentriciteta. Međutim, za razliku od vodonika, kod alkalnih metala ovi nivoi nisu degenerisani čak i kada zanemarimo relativističku promenu mase elektrona. Orbite sa najvećim ekscentricitetom 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 vodikovog 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 vodikovog 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 vodikovog 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.

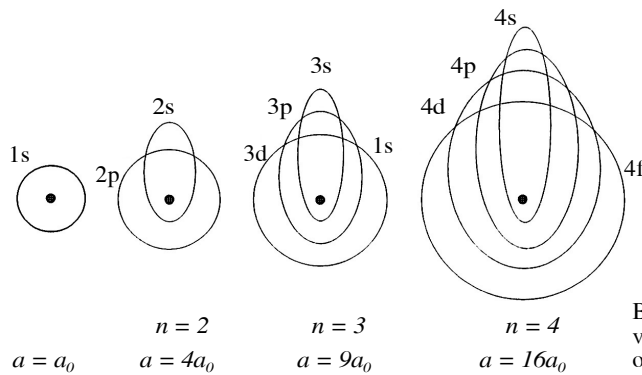
Pošto efektivno naelektrisanje zavisi od kvantnih brojeva n i n_ϕ razmotrićemo sistematski uticaj različitih vrednosti n_ϕ na energijsko stanje elektrona, Slika 4.7.3.

s orbita, $n_\phi = 1$. Ove elipse su najizduženije pa je za njih odstupanje energije od izraza (4.7.10) najveće. Elipsa za $n_\phi = 1$ 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 . Svako 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:

$$E = -\frac{hcR}{n^{*2}}. \quad (4.7.15)$$

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 :

$$\begin{aligned} E_{n,s} &= -\frac{hcR}{(n - \Delta_s)^2} \\ E_{n,p} &= -\frac{hcR}{(n - \Delta_p)^2} \\ E_{n,d} &= -\frac{hcR}{(n - \Delta_d)^2}. \end{aligned} \quad (4.7.16)$$

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:

$$\begin{aligned} n - \Delta_s &= k + s \\ n - \Delta_p &= k + p \\ n - \Delta_d &= k + d \end{aligned} \quad (4.7.17)$$

gde se zavisnost energije od glavnog kvantnog broja prenosi na celobrojni parametar k i numeričke konstante s , p i d :

$$\begin{aligned} E_{k,s} &= -\frac{hcR}{(k + s)^2} \\ E_{k,p} &= -\frac{hcR}{(k + p)^2} \\ E_{k,d} &= -\frac{hcR}{(k + d)^2}. \end{aligned} \quad (4.7.18)$$

Iz ovih izraza za energiju elektrona lako je dobiti odgovarajuće spektralne termove:

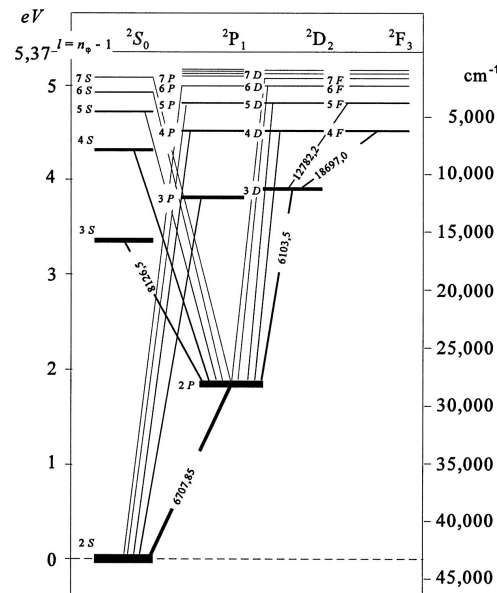
$$\begin{aligned} kS &= \frac{E_{k,s}}{hc} = -\frac{R}{(k + s)^2} \\ kP &= \frac{E_{k,p}}{hc} = -\frac{R}{(k + p)^2} \\ kD &= \frac{E_{k,d}}{hc} = -\frac{R}{(k + d)^2}. \end{aligned} \quad (4.7.19)$$

Prema izbornom pravilu, kvantni broj n_ϕ menja se za jedinicu, $\Delta n_\phi = \pm 1$, pa su mogući prelazi $S \rightarrow P, P \rightarrow D, P \rightarrow S, D \rightarrow F \dots$ 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	$\tilde{\nu} = 1S - kP$	$k = 2, 3, \dots$	
II sporedna	$\tilde{\nu} = 2P - kS$	$k = 2, 3, \dots$	(4.7.20)
I sporedna	$\tilde{\nu} = 2P - kD$	$k = 3, 4, \dots$	
fundamentalna	$\tilde{\nu} = 3D - kF$	$k = 4, 5, \dots$	

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 alkalijskih metala ($2s$ za litijum, $3s$ za natrijum, $6s$ za cezijum) predstavljaju zajedničkom vrednošću $k = 1$. Međutim, u praksi nije teško dokučiti o kojem parametru (k ili n) je reč.

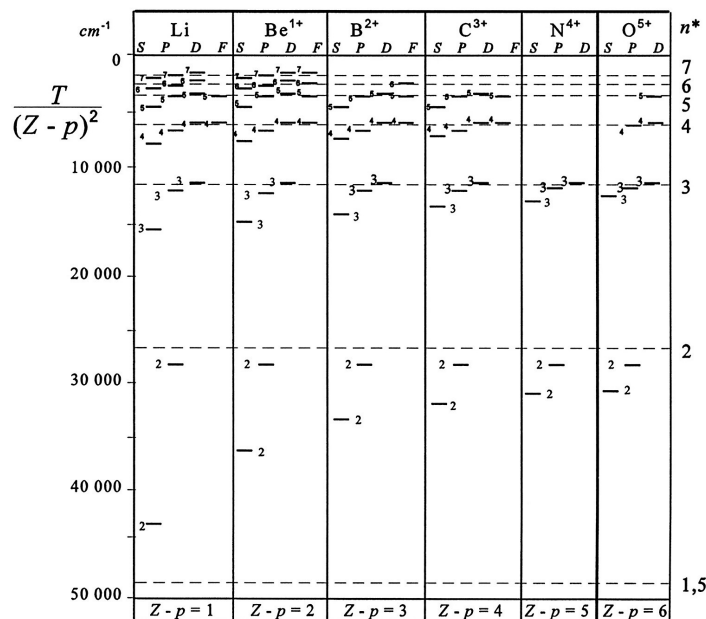
Dijagram energijskih stanja atoma litijuma prikazan je na Slici 4.7.4. On je u opštim crtama sličan dijagramu za vodonikov atom. Zbog pravila izbora, $\Delta n_\phi = \pm 1$ mogući su samo prelazi između susednih nizova termova.



Slika 4.7.4 Dijagram energijskih nivoa litijumovog atoma.

Na Slici 4.7.5 prikazan je sistem termova atoma litijuma i litijumu sličnih jona, $\text{Be}^+, \text{B}^{++}, \text{C}^{3+}, \text{N}^{4+}$ 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 $-n_\phi$ do $+n_\phi$ 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.:

$$s = \frac{1}{2} \quad \text{i} \quad m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (4.8.1)$$

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:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}. \quad (4.8.2)$$

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 :

$$|\vec{l}| = l\hbar \quad (4.8.3)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

koji je ekvivalentan Bor-Zomerfeldovom momentu ($L = n_\phi \hbar$, $n_\phi = 1, 2, \dots, n$.) i jednak njemu kada je:

$$l = n_{\varphi} - 1. \quad (4.8.4)$$

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 тумачењем strukture atoma, o čemu će više reći 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 :

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{za} \quad l > 0 \quad (4.8.5)$$

$$j = \frac{1}{2} \quad \text{za} \quad l = 0.$$

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} :

$$\Delta l = \pm 1 \quad \Delta l \neq 0$$

dok za j važi:

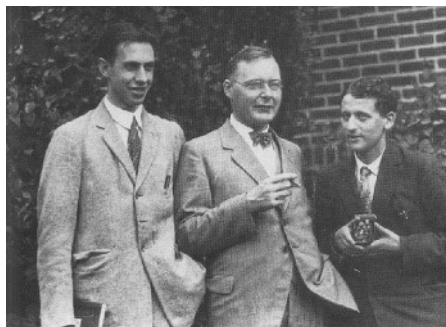
$$\Delta j = \pm 1, 0. \quad (4.8.6)$$

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:

$$\text{multiplentnost}(\text{orbitni kv. broj, } l)_{\text{unutrašnji kv. broj, } j}$$

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.

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.



Ulenbek, Kramer i Gudsmiit

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 Koenigsbergu (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.