

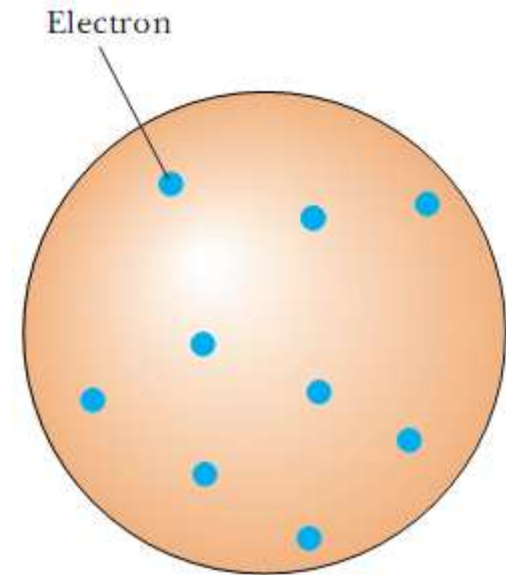
## *Uvod u atomsku fiziku*

Do kraja 20. stoljeća – Različiti modeli o građi materije (atoma).

**J.J. Thomson** – Atom je pozitivno nabijena kuglica u kojoj su vrlo sitni elektroni ravnomjerno raspoređeni. → Atom kao cjelina je neutralan.

Slikovito:

- Takav model sličio je ovalnom **puding**u ili kolaču s grožđicama (kao elektronima).
- Tvar je bila građena od gusto pakiranih atoma koji su bili međusobno vrlo blizu nanizani i ispunjavali su tvar.



Problemi:

- Pokusi s raspršenjem odnosno prolaskom dijela snopa elektrona kroz tanke metalne folije
- Nije se mogao objasniti diskretni spektar svjetlosti vodika pri električnom izboju.

1911. Ernest Rutherford (1871.-1937.)

-eksperiment koji je promijenio spoznaje o atomu

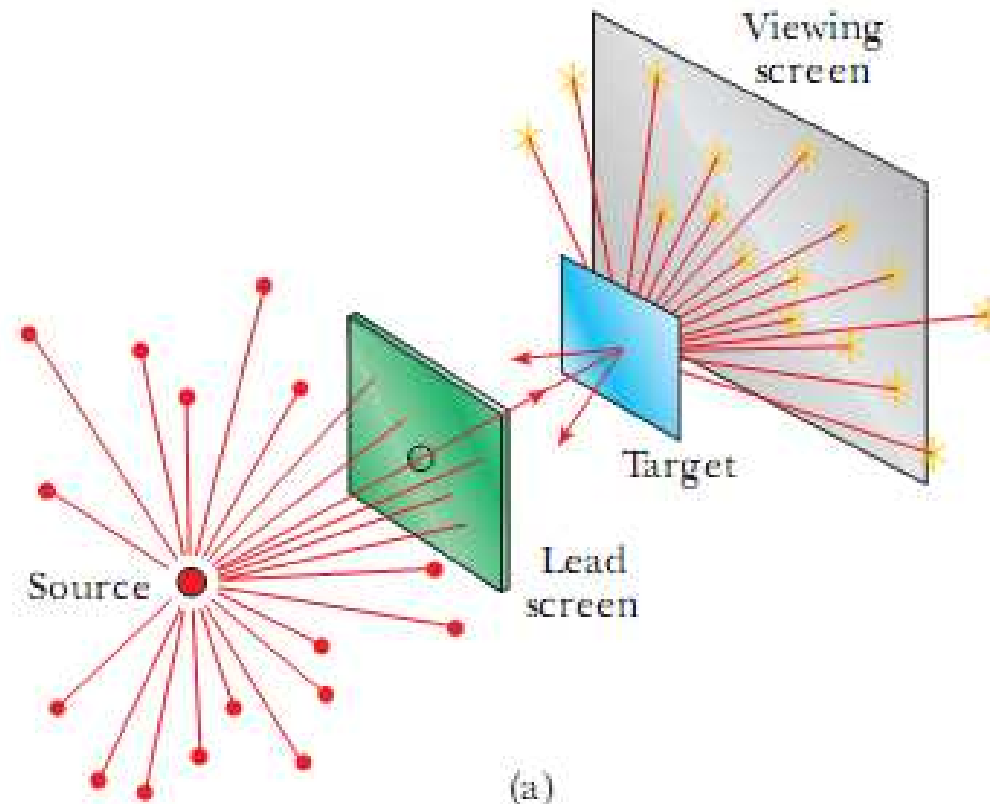
-raspršenje  $\alpha$ -čestica na tankim listićima zlata

-rezultati: većina  $\alpha$ -čestica prošla je kroz listiće zlata kao da su šuplji

-neke  $\alpha$ -čestice raspršile su se pod velikim kutem

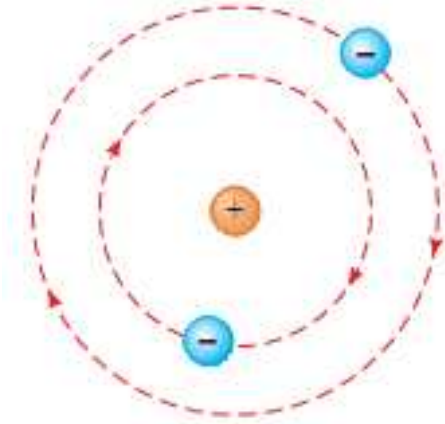
-neke  $\alpha$ -čestice **raspršile su se unazad** →

-*“To je tako nevjerovatno kao da ste ispalili metak u papir, a on se odbio nazad i pogodio vas”*



## Rutherfordovo objašnjenje pokusa:

- raspršenje pozitivnih  $\alpha$ -čestica unazad može se ostvariti jedino ako je pozitivan naboj atoma koncentriran u malom prostoru u odnosu na veličinu atoma – jezgri (a ne razmazan po atomu)
  - oko jezgre nalaze se elektroni, u relativno velikom prostoru izvan jezgre
  - elektroni ne padnu na jezgru jer se gibaju po putanjama – kao planeti oko Sunca
- Tako je nastao **Rutherfordov planetarni model atoma**.



## Nedostaci modela:

1. **linijski spektri**: atom emitira samo određene **diskretne karakteristične frekvencije** elektromagnetskog zračenja, i nikoje druge
2. **stabilnost atoma**: elektroni se gibaju oko jezgre i privlačna Coulombova sila uzrokuje centripetalnu akceleraciju elektrona; prema klasičnoj Maxwelllovoj teoriji elektromagnetizma, svaki naboj koji ubrzava (rotira frekvencijom  $f$ ) trebao bi zračiti elektromagnetski val te iste frekvencije; to bi za atom značilo da elektroni koji se gibaju oko jezgre gube svoju energiju, radijus putanje im se smanjuje i po spirali padaju na jezgru zračeći pri tome elektromagnetske valove sve većih frekvencija; → **kolaps atoma**

## *Linijski atomski spektri*

Užareno tijelo kao izvor svjetlosti. → Spektar je kontinuiran tj. sadrži raspodjelu intenziteta svjetlosti po svim valnim duljinama. (Sunčeva svjetlost pokazuje također kontinuirani spektar.)

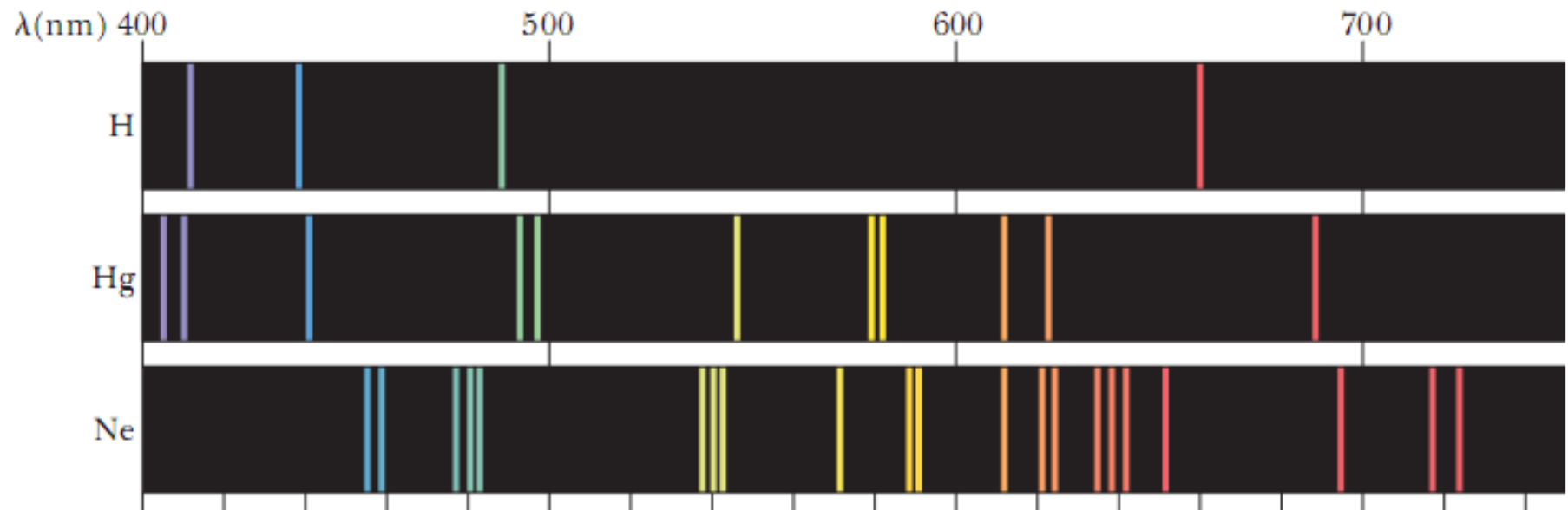
Električni izboj (Nastaje pri prolasku snopa elektrona kroz neki plin u staklenoj cijevi gdje se elektroni ubrzavaju razlikom potencijala između dviju elektroda). → Nakon sudara elektrona s atomima plina nastaje svjetlost – **emisijski spektar**.

→ Svjetlost usmjerimo na spektrometar (ili rešetku). →

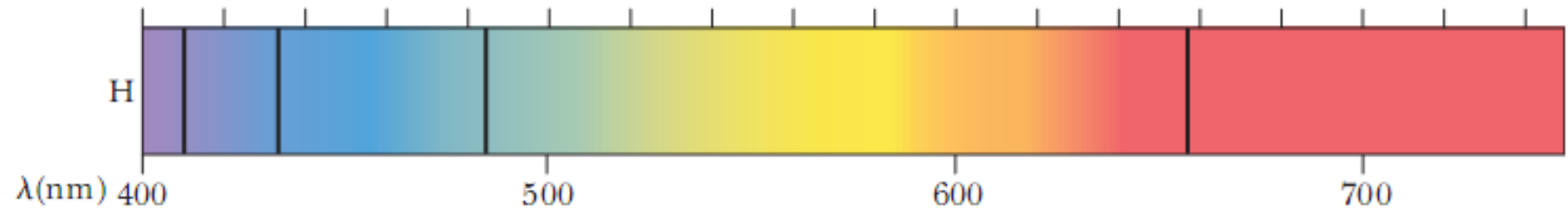
*Neočekivan rezultat! U spektru nastaje samo nekoliko boja, odnosno "linija" koje karakteriziraju atome plina.*

Pripadnu raspodjelu intenziteta svjetlosti po diskretnim valnim duljinama ili linijama nazivamo *linijskim spektrom*.

Valne duljine linija spektra određene su vrstom plina! → Vodik daje uvijek niz linija s istim valnim duljinama, natrij ima svoj spektar, itd. **Svaki atom ima svoj karakteristični spektar** → određivanje kemijskih elemenata u plinu.



(a)



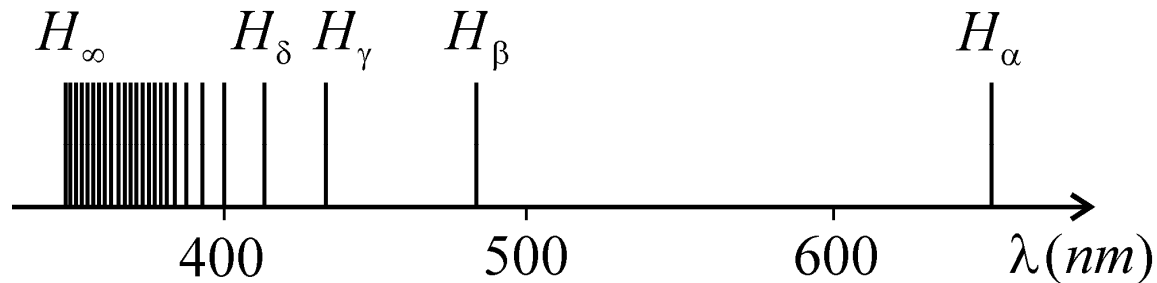
(b)

a) Emisijski spektar vodika, žive i neona.

**b) Apsorpcijski spektar** vodika – nastaje prolaskom kontinuiranog spektra (Sunčeve svjetlosti) kroz plin kemijskog elementa kojeg promatramo (vodika); tamne linije na istim valnim duljinama kao i emisijski spektar.

## *Linijski atomski spektri 2*

Linije spektra, osim područja vidljive svjetlosti, zalaze i u ultraljubičasto i infracrveno područje valnih duljina elektromagnetskih valova, koje oko ne vidi, ali se može detektirati npr. fotografski i dr.

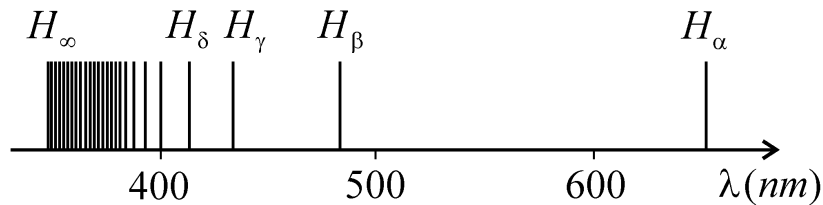


Linijski spektar vodika s pripadnim valnim duljinama:  
656,3 ( $H_\alpha$ ); 486,1 ( $H_\beta$ ); 434,1 ( $H_\gamma$ ); 410,2 ( $H_\delta$ )...; 364,6 ( $H_\infty$ ) nm.

3 linije vodikova spektra su bile poznate nekoliko stotina godina.

Za objašnjenje je trebalo nekoliko stoljeća.

## *Linijski atomski spektri 3*



**J. Balmer** (1885. god.) je pronašao pogodnu formulu u sljedećem obliku:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$\lambda$  = Valna duljina dane linije.

$R$  = Rydbergova konstanta (J. Rydberg, 19/20. st.)  $R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$

$n \rightarrow$  Cijeli broj,  $n = 3, 4, 5, 6, \dots$

$n = 3 \rightarrow H_\alpha$

$n = 4 \rightarrow H_\beta$

$n = 5 \rightarrow H_\gamma$

...

$n = \infty \rightarrow H_\infty = 364,6 \text{ nm} \rightarrow$  Najkraća valna duljina u danom spektru (nalazi se u ultraljubičastom području valnih duljina).

**Balmerova serija** = Niz valnih duljina opisanih gornjom jednačbom.

## *Linijski atomski spektri 4*

Kasnije su otkrivene i druge spektralne serije vodika. Poznate su po prezimenima njihovih pronalazača.

Opći oblik jednačbe za tzv. valni broj ( $1/\lambda$ ) za sve serije vodika možemo pisati slično Balmerovoj formuli:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = m+1, m+2, \dots,$$

*Cjelobrojni  $m$  pripada pojedinim serijama:*

<i><math>m</math></i>	<i>serija</i>	<i>područje valnih duljina (nm)</i>
1	<b>Lymanova</b>	91 - 122
2	<b>Balmerova</b>	365 - 656
3	<b>Paschenova</b>	821 - 1876
4	<b>Brackettova</b>	1459 - 4053
5	<b>Pfundova</b>	2280 - 17462

*ultraljubičasto*

*vidljiva (veći dio)*

*infracrveno*



## *Linijski atomski spektri 5*

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Izraz se ponekad piše kao izraz za frekvencije svjetlosti ( $\nu = c/\lambda$ ). →  
Balmerova serija:

$$\nu = Rc \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

→ Frekvencija svjetlosti, koju emitira atom, može se pisati kao razlika dva člana, takozvana *terma*.

Osim vodika, još nekoliko elemenata (koji daju linijske spektre pri električnom izboju u plinu) kao He<sup>+</sup> (jedanput ionizirani helij), Li<sup>++</sup>, i sl., mogu se opisati sličnom formulom, Balmerovog oblika.

## *Struktura atoma*

Kraj 19. st. i početak 20. st. → Niz vrlo važnih otkrića!

Diskretna struktura linijskih atomskih spektara.

Planck (1901. god.) - Uvodi pojam kvanta energije,  $E = h\nu$  (gdje je Planckova konstanta,  $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ )

Einstein - Objasnio fotoelektrični efekt.

Fotoelektrični efekt - Metal obasjan svjetlošću oslobađa negativno nabijene čestice, elektrone.

Pojava u kojoj snop svjetlosti poput mnoštva čestica, kvanta energije ili fotona, pada na metal i svoju energiju predaje elektronima, koji izvode tzv. rad izlaza ( $W$ ) i napuštaju metal kao slobodni elektroni s kinetičkom energijom ( $K = mv^2/2$ ); kinetička energija elektrona jednaka je razlici energije upadnog fotona ( $h\nu$ ) i rada izlaza metala, ili:  $K = h\nu - W$

## *Struktura atoma 2*

Kraj 19. st. i početak 20. st. → Niz vrlo važnih otkrića!

E. Rutherford (početak 20. stoljeća, Engleska) - Izvodi pokuse u kojima su folije zlata bombardirane alfa česticama iz radioaktivnog urana;

Te nabijene čestice su prolazile kroz metalni listić i otklanjale se, što je upućivalo na strukturu atoma planetarnog modela (središnji dio atoma ili jezgra ima glavninu mase poput Sunca u solarnom sustavu; oko jezgre se gibaju elektroni kao planeti oko Sunca, a i u atomu je velika praznina između jezgre i elektrona). (Meci kroz plast sijena!)

Sav pozitivni naboj atoma skoncentriran je u jezgri, vrlo malog volumena (s promjerom jezgre oko  $10^{-14}$  m).

U preostalom dijelu atoma (promjera blizu  $10^{-10}$  m), ili atomskom omotaču, nalazi se oblak negativnih elektronskih naboja.

Ukupno je u atomu jednaka količina + i – naboja, pa je atom električki neutralan.

## *Struktura atoma 3*

Jezgra atoma - Protoni, nositelji pozitivnog naboja, i neutroni koji su električki neutralni, i s masom približno jednakom masi protona.

U atomu je broj protona jednak broju elektrona (redni broj atoma (Z) ili kemijskog elementa u periodnom sustavu elemenata).

Masa elektrona je puno manja (1836 puta) od mase protona, pa je praktički sva masa atoma (oko 99,9 %) sadržana u jezgri.

Elektron se giba oko jezgre po putanji, koja je u najjednostavnijem slučaju kružnica (npr. kod atoma vodika), a pri takvom gibanju ulogu centripetalne sile igra privlačna Coulombova sila između elektrona i protona te vrijedi jednadžba:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

$r$  = radijus putanje,  $v$  = brzina elektrona,  $\epsilon_0$  (dielektrična konstanta za vakuum) =  $8,85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2$ ), masa elektrona  $m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  i naboj  $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ .

## *Struktura atoma 4*

Elektron u atomu  $\rightarrow$  Centripetalno ubrzanje  $v^2/r$  .

$v$  (obodna brzina) = *oko  $10^6$  m/s*.

Zakoni klasične elektrodinamike  $\rightarrow$  Elektron bi zbog ubrzanja (promjene vektora brzine na kružnoj putanji) trebao emitirati EM valove s frekvencijom koju ima elektron kao kružnu frekvenciju na putanji oko jezgre.  $\rightarrow$

Zbog emisije elektromagnetskog zračenja energija elektrona bi se trebala smanjivati, te bi elektron trebao smanjiti radijus putanje i na kraju pasti u jezgru.

To se ne događa u prirodi!  $\rightarrow$  Zaključujemo: *Na atom se ne mogu primijeniti zakoni klasične fizike.*

## *Struktura atoma 5*

**N. Bohr** – Poznao eksperimentalne rezultate o linijskim spektrima, fotoelektričnom efektu, raspršenju elektrona i alfa čestica na metalnim folijama, i dr., te ideju kvanta energije i fotona svjetlosti, kao i poteškoće u njihovoj interpretaciji.

N. Bohr (1913.) - Objavio postulate o kvantiziranoj strukturi atoma:

***Prvi Bohrov postulat:*** Atom boravi u određenom stacionarnom stanju najniže energije, ako na njega ne djeluje neka vanjska sila; elektron se može gibati oko jezgre samo po kvantiziranim stazama, a pri tom elektron ne emitira energiju.

***Drugi Bohrov postulat:*** Atom prima ili odašilje energiju samo kad njegov elektron prelazi iz jedne u drugu stazu.

Ako se elektronu dovede energija, može doći do apsorpcije kvanta energije i elektron prelazi u više, pobuđeno energijsko stanje ili na dalju kvantiziranu stazu (s obzirom na jezgru).

## *Struktura atoma 6*

Pri spontanom povratku u niže energijsko stanje elektron odašilje kvant energije elektromagnetskog zračenja,  $h\nu$ , ili foton; energija je fotona jednaka razlici energija dviju staza, ili dviju energijskih razina, tj.

$$h\nu = E_m - E_n$$

$m, n$  = cijeli brojevi; označuju redni broj kvantne staze.

$m > n \rightarrow$  Emisija kvanta energije  $E_m - E_n$

$m < n \rightarrow$  Apsorpcija kvanta energije  $E_m - E_n$

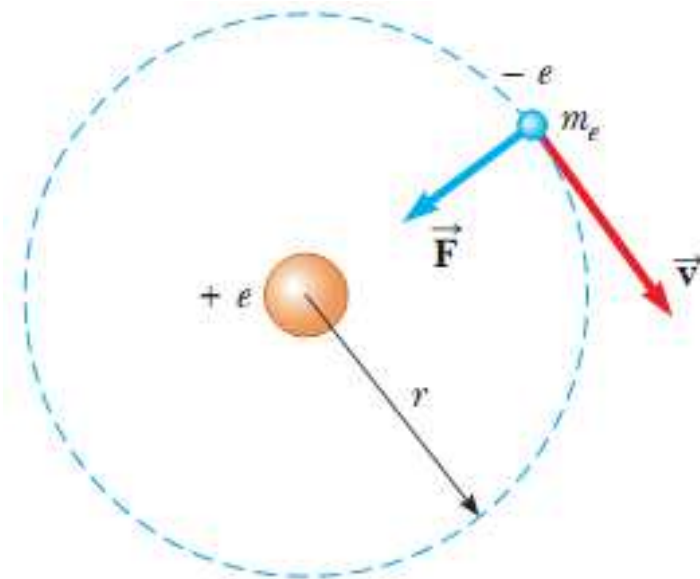
***$\rightarrow$  Frekvencija emitiranog svijetla iz atoma određena je razlikom energijskih razina pripadnog "skoka" elektrona; emitirane frekvencije imaju diskretan spektar.***

## Struktura atoma 7

**Treći Bohrov postulat** (govori o kvantiziranju staza) = Elektroni mogu boraviti samo u onim energijskim stanjima ili stazama (orbitama) u kojima je njihov zakretni impuls (kutna količina gibanja,  $L$ ) jednak umnošku tzv. reducirane Planckove konstante ( $\hbar = h/2\pi$ ) i neke cjelobrojne vrijednosti ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ):

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

**Primjena Bohrovih postulata:** → Opravdanje za **diskretnu strukturu atomskih linijskih spektara**. Mogu se izračunati frekvencije ili valne duljine pojedinih serija za atom vodika.





## Struktura atoma 7

Polumjeri staza elektrona?

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m}{r} \left( \frac{nh}{2\pi mr} \right)^2$$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m}{r} \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m^2 r^2} \quad \longrightarrow \quad \frac{e^2}{\epsilon_0} = \frac{1}{r} \frac{n^2 h^2}{\pi m} \quad \longrightarrow \quad r_n = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{m e^2 \pi}$$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad \begin{array}{l} mvr = n \frac{h}{2\pi} \\ v = n \frac{h}{2\pi mr} \end{array}$$

$n$  = indeks s oznakom rednog broja staze

$n = 1$  i pripadne vrijednosti konstanti, gornja jednačba daje vrijednost radijusa prve staze vodikovog atoma (tzv. **Bohrov radijus atoma**) :

$$r_1 = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m.}$$

## Struktura atoma 8

$$r_n = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{m e^2 \pi} \quad \longrightarrow$$

Radijusi viših staza su također kvantizirani!  $\rightarrow$

$r_n = n^2 r_1$ ; tako je  $r_2 = 4 r_1$ ,  $r_3 = 9 r_1$ , itd.

Brzina elektrona u atomu?

Koristimo:  $mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad \longrightarrow \quad mv \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{m e^2 \pi} = n \frac{h}{2\pi} \quad \longrightarrow \quad v_n = \frac{e^2}{2nh\epsilon_0}$

$\rightarrow$  **Brzina elektrona na prvoj stazi odnosno u osnovnom stanju atoma vodika iznosi:  $v_1 = 2 \cdot 10^6$  m/s.**

Ukupna energija elektrona u atomu?

Jednaka je zbroju kinetičke i potencijalne energije, tj.  **$E = K + U$** :

$$K = \frac{mv^2}{2} \quad U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$U$  se dobije integriranjem električne sile, na putu  $dr$  i u granicama od  $r$  do besk.

## Struktura atoma 9

$$r_n = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{m e^2 \pi} \quad \longrightarrow \quad U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad K = \frac{mv^2}{2} \quad \longleftarrow \quad v_n = \frac{e^2}{2nh\epsilon_0}$$

$$\longrightarrow \quad U = -\frac{me^4}{4\epsilon_0^2 n^2 h^2}$$

$$\longrightarrow \quad K = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2}$$

Ukupna energija elektrona u atomu na  $n$ -toj stazi: 
$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2}$$

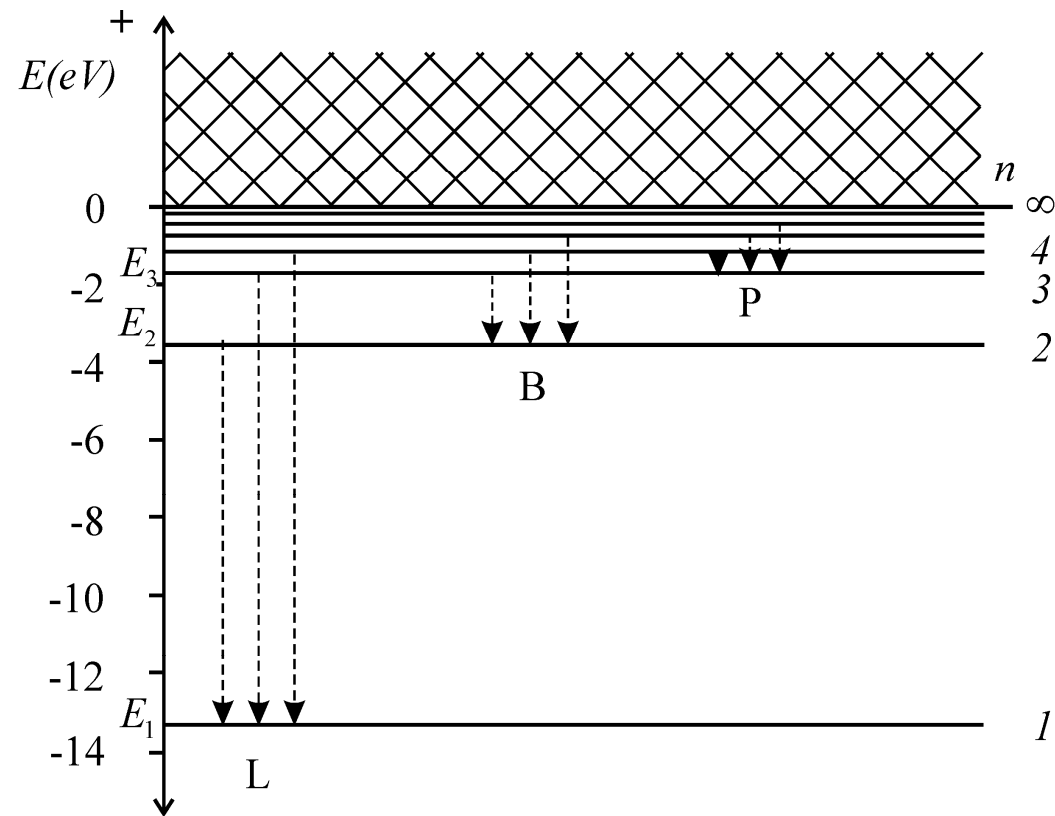
→ Energijske razine u atomu su kvantizirane; ukupna energija elektrona u atomu je **negativna** (elektron je vezan za atom) i poprima vrijednost ničice za  $n = \infty$ .

→ Elektron izvan atoma ima pozitivnu kinetičku energiju, koju on može kontinuirano (bilo kako) mijenjati.

Grafički prikaz:

# Struktura atoma 10

Grafički prikaz:

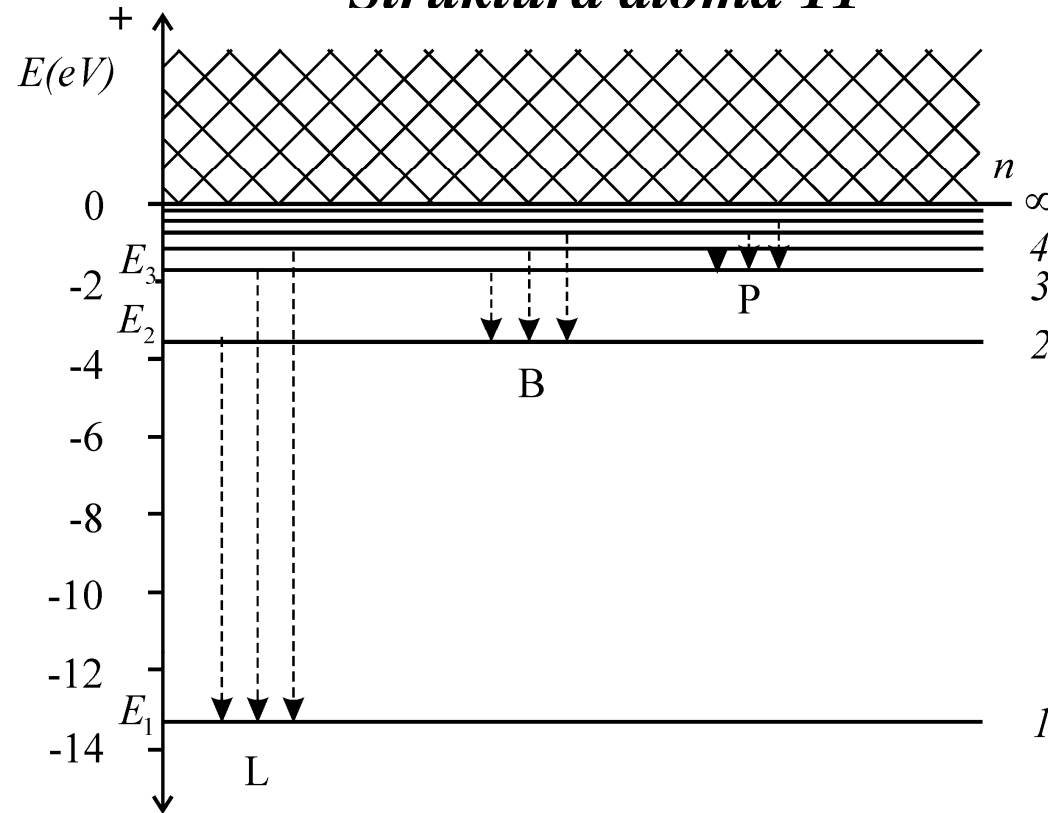


Energijski spektar za vodikov atom;

**L** označuje skokove elektrona za Lymanovu seriju,

**B** za Balmerovu seriju, itd.

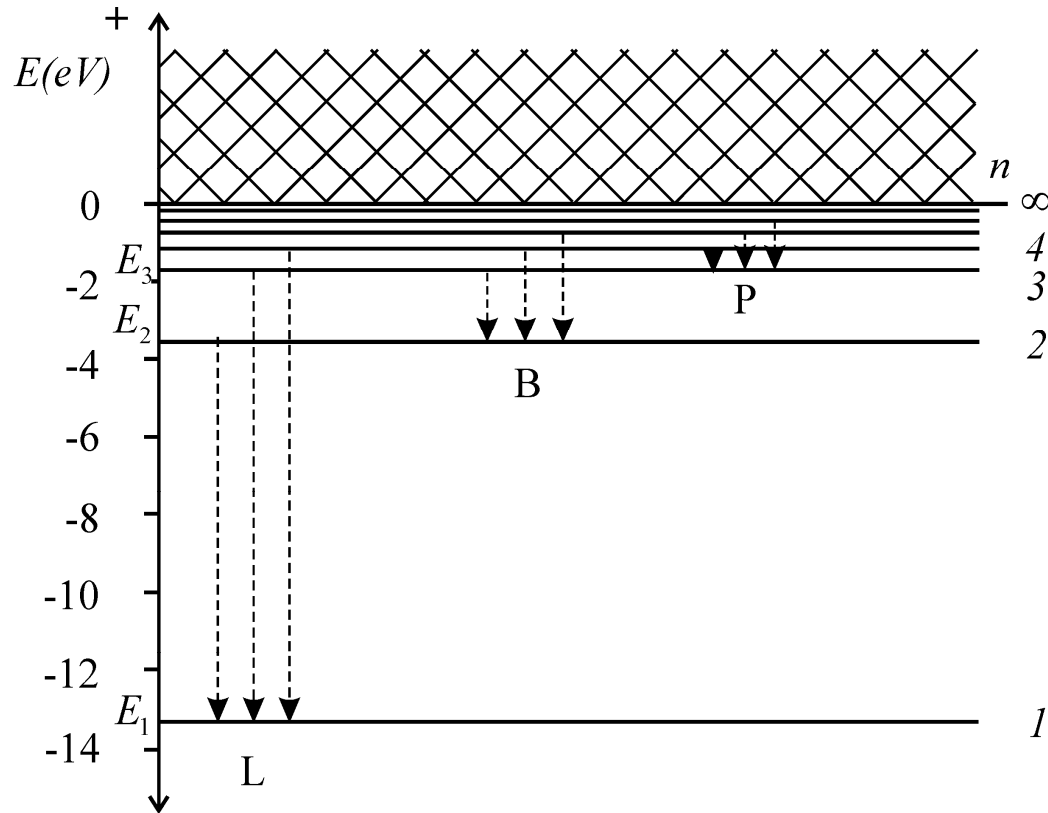
## Struktura atoma 11



Postupak odvajanja elektrona od atoma nazivamo *ionizacijom*, a do nje dolazi kad se elektronu u atomu dovede izvana energija, koja je jednaka ili veća od apsolutnog iznosa energije elektrona u atomu.

Energija ionizacije odgovara po iznosu upravo energiji elektrona u stabilnom stanju atoma.

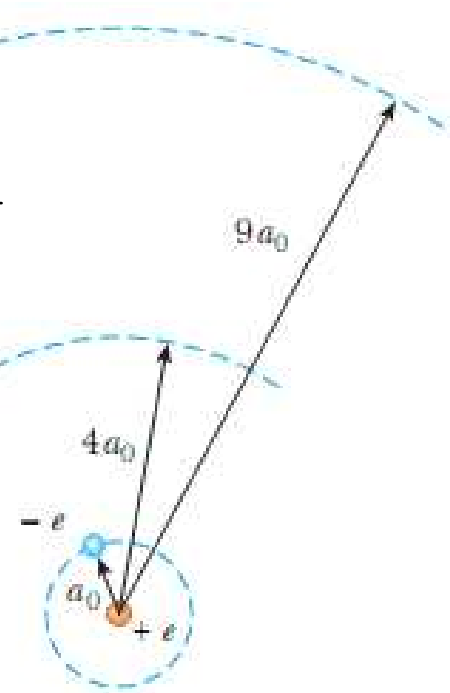
## Struktura atoma 11



$$r_n = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{m e^2 \pi}$$

$a_0$  za  $n=1$

$a_0 = 0.05 \text{ nm}$



Energija prve staze u atomu vodika, ili prva energijska razina stabilnog stanja vodika:  $E_1 = -13,6 \text{ eV}$  ( $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ ).

Druga razina ima po apsolutnom iznosu 4 ( $= 2^2$ ) puta manju vrijednost energije, tj.  $E_2 = -3,4 \text{ eV}$  (što je zapravo prva viša ili pobuđena energijska razina s obzirom na osnovnu razinu).

$E_3 = E_1/9 = -1,5 \text{ eV}$ , itd

## Struktura atoma 12

Kolika je energija emitiranog fotona, npr. za skok elektrona s treće na drugu stazu ?

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} \quad h\nu = E_3 - E_2 \quad \longrightarrow \quad h\nu = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

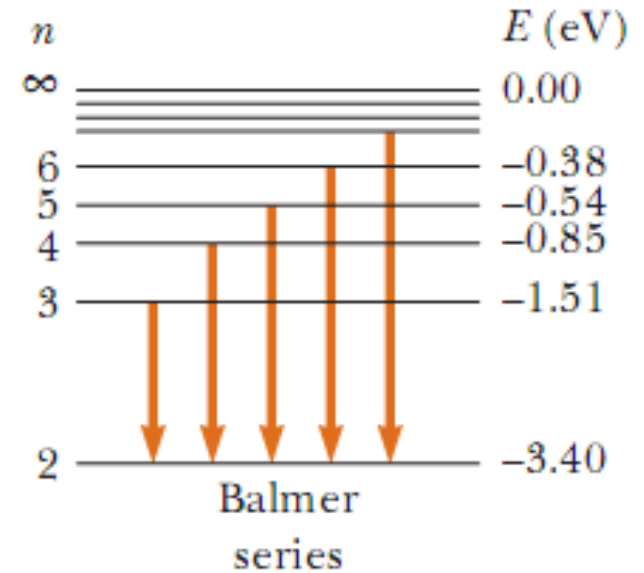
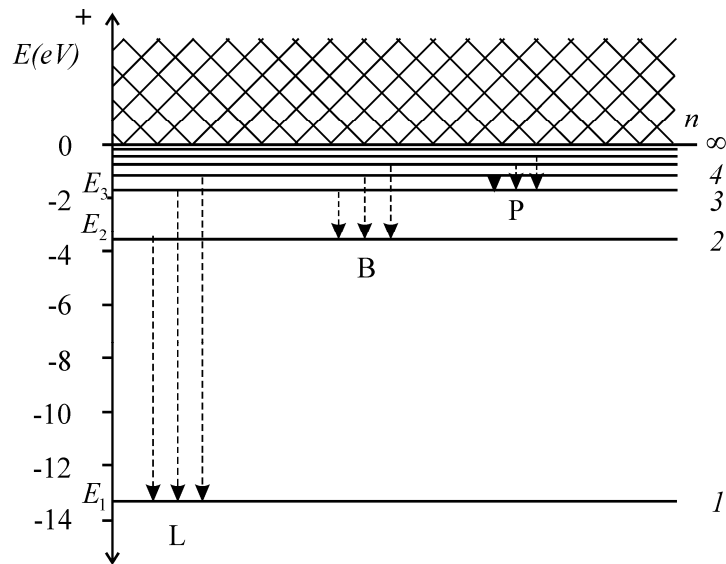
$$\nu = c / \lambda \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 c} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

Usporedimo izraz s Balmerovom formulom za valni broj linije  $H_\alpha$  vodikovog atoma:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) \quad \longrightarrow \quad \text{Rydbergova konstanta}$$

$$R = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 c} \quad \longrightarrow \quad R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

## Struktura atoma 13



Zaključak: **Lymanova** serija nastaje uz emisiju fotona, i to nakon pobude atoma vodika i povratka elektrona s druge na prvu stazu, zatim s treće na prvu stazu, pa s četvrte na prvu stazu, itd.;

**Balmerova** serija nastaje skokom, tj. povratkom pobuđenog elektrona s treće na drugu stazu (što daje liniju), zatim s četvrte na drugu stazu (što daje liniju), pa s pete na drugu, itd.

Kod **Pashenove** serije promatramo skokove elektrona s viših na treću stazu, te slično za druge serije.



## *Struktura atoma 14*

Kvantizirani Bohrov atom je **uspješno protumačio** diskretnu strukturu **linijskih atomskih spektara**.

Eksperimentalna potvrda pri mjerenju ionizacijskih energija, npr. za atome živinih para, i dr.; eksperimentalni rezultati se razlikuju primjerice za 0,2 % pri proračunu Rydbergove konstante.

**Da li Bohrova teorija vrijedi** i za atomske strukture koje su **složenije** od vodikovog atoma?

Vrijedi **samo približno** ili je nezadovoljavajuća!

Za složenije atome treba uzeti u obzir i odbojne sile među istovrsnim nabojima, te neizbježne pogreške u mjerenju položaja ili brzine čestice, a u skladu s tzv. relacijom neodređenosti (putanja elektrona ne može biti točno određena).

Točniju sliku daje **kvantna mehanika** koja govori o vjerojatnosti nalaženja elektrona na nekom mjestu u atomu, i dr.

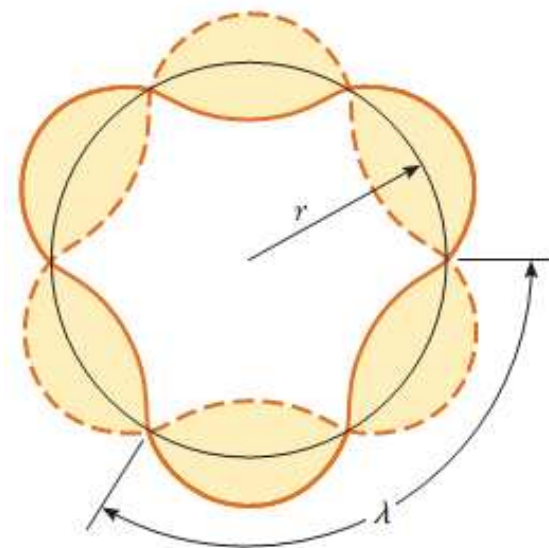
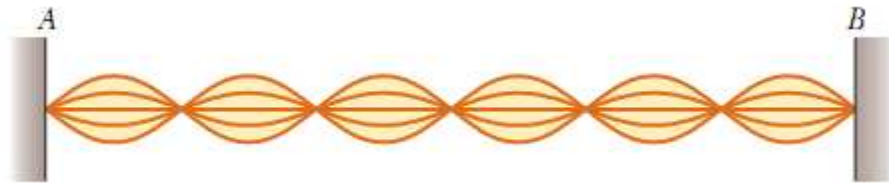
## *Struktura atoma 15*

**Kvantna mehanika** može doći do svih relacija koje su slijedile iz Bohrovog modela atoma (i još puno više), primjerice kvantizirane energijske razine u atomu, možemo izvesti i bez Bohrovih postulata.

Kolegij kvantna mehanika daje potpun prikaz građe atoma.

Ukratko:

**L. de Broglie** → Predložio da se svakoj čestici može pripisati valni karakter, po uzoru na foton. Objasnio Bohrov zahtjev za kvantizacijom orbitalnog momenta  $L$  (kutne količine gibanja, zakretnog impulsa): orbita elektrona bit će stabilna ako sadrži cijeli broj valnih duljina, tj. ako formira stojni val.



Uvjet da de Brogliev val bude stojni val:

$$2\pi r = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\lambda = h/m_e v$$

$$2\pi r = nh/m_e v$$

$$m_e v r = n\hbar \quad = \text{Bohrova kvantizacija } L$$

E. Schroedinger (1926. god.) je izveo valnu jednadžbu koja opisuje gibanje čestice mase  $m$ , ukupne energije  $E$  i potencijalne energije  $U$ :

$$\Delta\Psi(x, y, z) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - U(x, y, z)]\Psi(x, y, z) = 0$$

$\Psi$  = Valna funkcija (zavisi samo o prostornim koordinatama)

$\Delta$  = Laplaceov operator

## *Struktura atoma 15*

$$\Delta\Psi(x, y, z) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - U(x, y, z)] \Psi(x, y, z) = 0$$

Od valne funkcije  $\Psi$ , kao rješenja diferencijalne jednačbe drugog reda, traži se da bude jednoznačna i konačna u cijelom prostoru te da je kontinuirana i ima neprekinutu derivaciju.

Takvo rješenje valne jednačbe postoji samo za neke vrijednosti parametara (ili određene vrijednosti energije), koje nazivamo vlastitim vrijednostima ( $E_1, E_2, \dots, E_n$ ), a rješenja nazivamo vlastitim funkcijama:

$$\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$$

Za valno gibanje čestice u ograničenom prostoru, kao što je elektron u atomu, energijski spektar je diskretan; slobodnom gibanju čestice odgovara kontinuirani spektar energija (npr. za elektron izvan atoma).

Statistička interpretacija valne funkcije kaže kako svakoj točki prostora pripada određena vjerojatnost nalaženja čestice na tom položaju; pripadna vjerojatnost odgovara kvadratu apsolutne vrijednosti valne funkcije  $\Psi$ .

# Kvantni brojevi

Svi kvantni brojevi uvedeni su da bi se **objasnili eksperimentalni rezultati spektralnih linija** kemijskih elemenata.

## 1. Glavni kvantni broj $n$

- uveden Bohrovom kvantizacijom kutne količine gibanja (**angularnog momenta**)
- određuje **ukupnu energiju** dozvoljenog stanja atoma vodika
- sva stanja s istim  $n$  nazivaju se **ljuske** i označavaju se velikim slovima K, L, M, N,... što odgovara stanju s  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

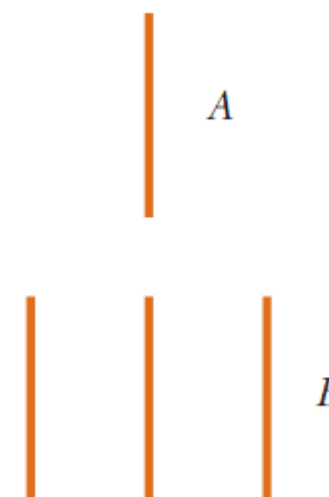
## 2. Orbitalni kvantni broj $l$

- Arnold Sommerfeld** (1868.-1951.) proširio Bohrov model atoma uzevši u obzir i eliptične putanje – uveo  $l$  s dozvoljenim cjelobrojnim vrijednostima  $l = 0$  do  $n - 1$ .
- određuje orbitu elektrona; za dani  $n$ , ima  $n$  dozvoljenih orbita;
- stanja s istim  $l$  nazivaju se podljuske i označavaju se malim slovima  $s, p, d, f, \dots$  što odgovara  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

### 3. Orbitalni magnetski kvantni broj $m_l$

-uveden nakon Zeemanovog efekta: cijepanje spektralne linije plina, kada se plin stavi u jako magnetsko polje; linija se cijepala na 3 nove bliske linije (mala promjena valne duljine) → energija elektrona se promijeni kada se nalazi u magnetskom polju

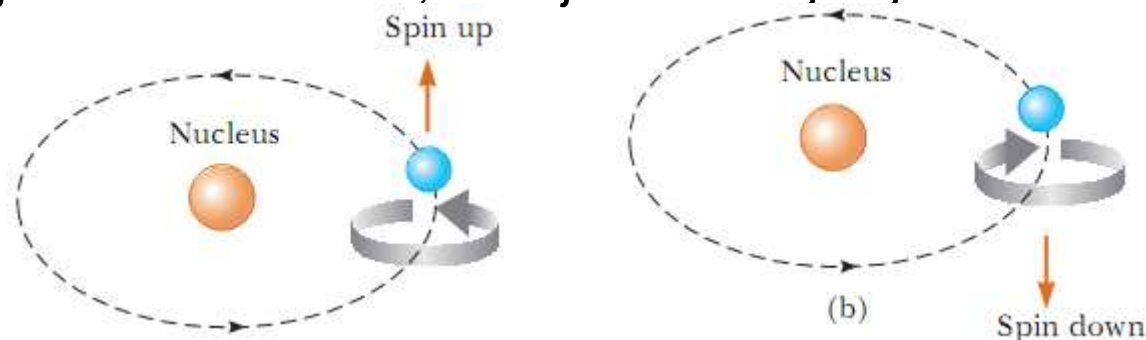
-dozvoljene vrijednosti su od  $-l$  do  $l = 2l + 1$  vrijednost



### 4. Kvantni broj spina (spinski magnetski kvantni broj), $m_s$

-uveden da bi se objasnilo cijepanje spektralne linije kad se gleda spektar u visokoj rezoluciji – čak i bez primjene magnetskog polja; ovo cijepanje naziva se fina struktura;

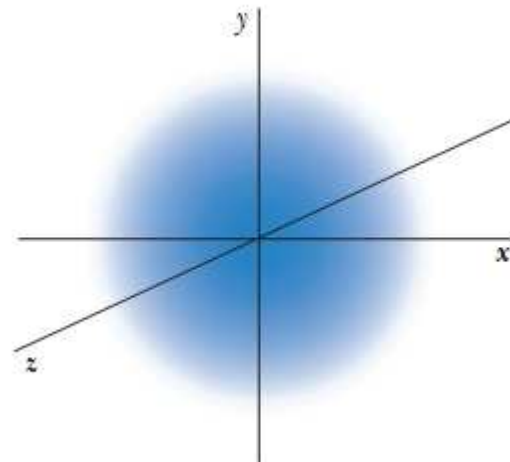
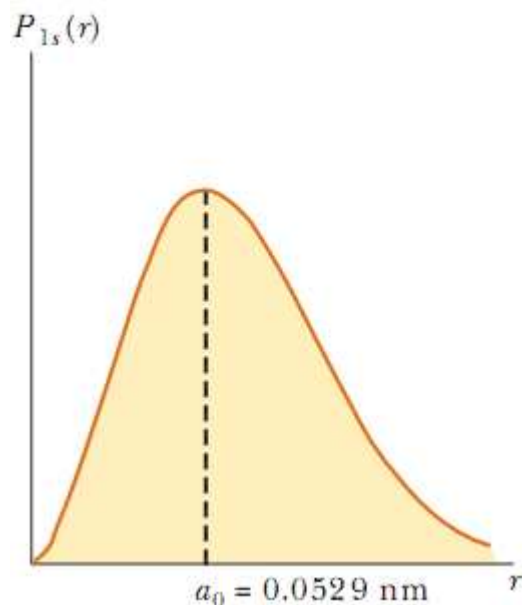
-1925. Samuel Goudsmit i George Uhlenbeck uveli su ideju vrtnje elektrona oko osi da bi objasnili podrijetlo fine strukture; time je uveden još jedan kvantni broj: kvantni broj spina  $m_s$



Kvantna teorija također uvodi **kvantne brojeve**, ali oni su rezultat rješavanja Schredingerove valne jednačbe uz zadane rubne uvjete, a ne uvode se da bi objasnili eksperimentalne rezultate.

Kvantni broj spina uvodi se u Diracovoj relativističkoj kvantnoj teoriji i nema veze ni sa kakvom vrtnjom elektrona oko osi. Spin je jedno intrinzično svojstvo elektrona (poput naboja ili mase elektrona) koje se može opisati pomoću spinskog kvantnog broja.

Pojam orbite također nema značenje u kvantnoj teoriji već se iz kvadrata valne funkcije određuje vjerojatnost nalaženja elektrona u određenoj točki prostora. Ta vjerojatnost za osnovno stanje atoma vodika najveća je za radijus  $a_0$  prve Bohrove orbite, ali postoji i vjerojatnost za neke druge radijuse.



Sferni elektronski oblak za osnovno stanje atoma vodika – gušći dio oblaka predstavlja područje veće vjerojatnosti nalaženja elektrona.

# Paulijev princip isključenja i periodni sustav elemenata

Pauli 1925.

Koliko elektrona u atomu može imati iste kvantne brojeve?

Ne postoje 2 elektrona u atomu koja imaju iste kvantne brojeve.

Na istom energetsom stanju mogu biti dva elektrona (spin gore i dolje), ali ne mogu biti dva elektrona u istom kvantnom stanju.

Korištenjem Paulijevog principa, počevši od atoma vodika i dodavajući po jedan elektron, možemo izgraditi cijeli periodni sustav elemenata. Prvo se popunjavaju najniže ljuske i podljuske, a onda one na višim energijama, jer svaki sustav u prirodi teži energetsom minimumu. Podljuska je popunjena kada sadrži  $2(2l+1)$  elektrona.

Number of Electrons in Filled Subshells and Shells			
Shell	Subshell	Number of Electrons in Filled Subshell	Number of Electrons in Filled Shell
K ( $n = 1$ )	$s(\ell = 0)$	2	2
L ( $n = 2$ )	$s(\ell = 0)$	2	8
	$p(\ell = 1)$	6	
M ( $n = 3$ )	$s(\ell = 0)$	2	18
	$p(\ell = 1)$	6	
	$d(\ell = 2)$	10	
N ( $n = 4$ )	$s(\ell = 0)$	2	32
	$p(\ell = 1)$	6	
	$d(\ell = 2)$	10	
	$f(\ell = 3)$	14	



### Electronic Configurations of Some Elements

Z	Symbol	Ground-State Configuration	Ionization Energy (eV)	Z	Symbol	Ground-State Configuration	Ionization Energy (eV)
1	H	$1s^1$	13.595	19	K	[Ar] $4s^1$	4.339
2	He	$1s^2$	24.581	20	Ca	$4s^2$	6.111
3	Li	[He] $2s^1$	5.390	21	Sc	$3d4s^2$	6.54
4	Be	$2s^2$	9.320	22	Ti	$3d^24s^2$	6.83
5	B	$2s^22p^1$	8.296	23	V	$3d^34s^2$	6.74
6	C	$2s^22p^2$	11.256	24	Cr	$3d^54s^1$	6.76
7	N	$2s^22p^3$	14.545	25	Mn	$3d^54s^2$	7.432
8	O	$2s^22p^4$	13.614	26	Fe	$3d^64s^2$	7.87
9	F	$2s^22p^5$	17.418	27	Co	$3d^74s^2$	7.86
10	Ne	$2s^22p^6$	21.559	28	Ni	$3d^84s^2$	7.633
11	Na	[Ne] $3s^1$	5.138	29	Cu	$3d^{10}4s^1$	7.724
12	Mg	$3s^2$	7.644	30	Zn	$3d^{10}4s^2$	9.391
13	Al	$3s^23p^1$	5.984	31	Ga	$3d^{10}4s^24p^1$	6.00
14	Si	$3s^23p^2$	8.149	32	Ge	$3d^{10}4s^24p^2$	7.88
15	P	$3s^23p^3$	10.484	33	As	$3d^{10}4s^24p^3$	9.81
16	S	$3s^23p^4$	10.357	34	Se	$3d^{10}4s^24p^4$	9.75
17	Cl	$3s^23p^5$	13.01	35	Br	$3d^{10}4s^24p^5$	11.84
18	Ar	$3s^23p^6$	15.755	36	Kr	$3d^{10}4s^24p^6$	13.996

1871. **Dmitrij Ivanovič Mendeljejev** (1834.-1907.) ruski kemičar – poredao je elemente po atomskoj masi i kemijskim svojstvima → prazna mjesta u tablici → popunjena novim kasnije otkrivenim elementima čija je svojstva predvidio Mendeljejev

## *Laseri*

Početak druge polovice 20. stoljeća otkriven je *maser* (akronim, engl. – *Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation*).

Vrlo brzo i prvi *laser* (akronim – *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*) s rubinskim štapićem kao aktivnim materijalom za pojačanje vidljivog zračenja.

Pri upadu elektromagnetskog zračenja u tvar nastaje interakcija atoma (molekula), ili električnih dipola, s električnim poljem, koje kao upadna svjetlost potiče titranje dipola tj. elektronskog oblaka u atomu.

Zavisno o razlici faza titranja dipola i vala električnog polja, dipol može:

- a) Apsorbirati energiju polja → *normalna ili pozitivna apsorpcija*
- b) Pojačati je u obliku stimulirane emisije zračenja. → *negativna apsorpcija svjetlosti*

## *Laseri 2*

Normalna apsorpcija svjetlosti u tvari zadovoljava eksponencijalni zakon:  $I = I_0 e^{-\alpha x}$

$I$  = prolazni intenzitet svjetlosti kroz apsorber debljine  $x$

$I_0$  = upadni intenzitet svjetlosti

$\alpha$  = pozitivni koeficijent apsorpcije

Za  $\alpha < 0$  (slučaj negativnog koeficijenta apsorpcije). → Pri prolazu svjetlosti kroz tvar intenzitet svjetlosti se pojačava s povećanjem puta  $x$ .

U takvom mediju (nazivamo ih aktivnim), broj fotona se povećava kao lavina zbog stimulirane emisije, koja prevladava u procesima interakcije.

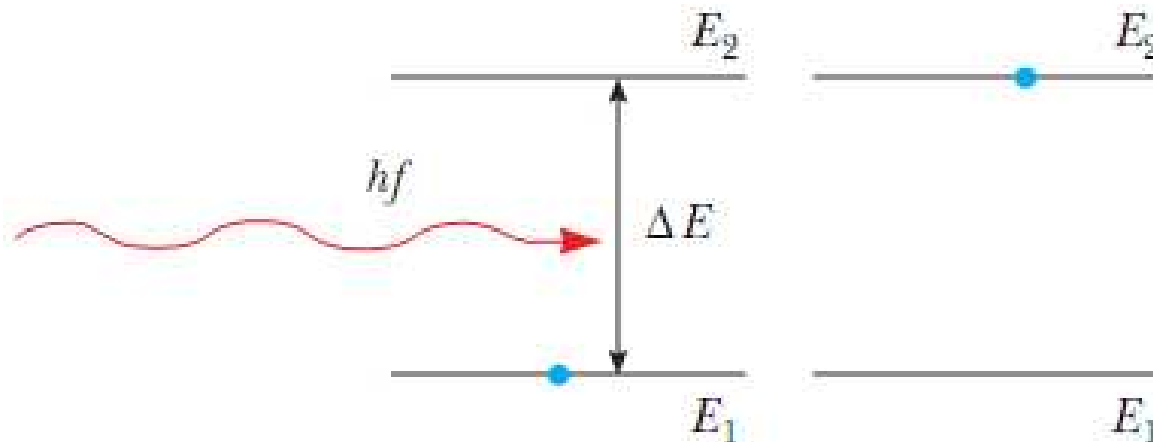
**Einstein** - Predvidio je stimuliranu emisiju zračenja. (Pokazao je kako atom u elektromagnetskom polju svjetlosnih valova ima svojstva električnog dipola, pa u prisustvu električnog polja on može pojačati energiju polja putem **stimulirane emisije**.)

## *Laseri 3*

Kvantno - mehanički prikaz - Atom koji boravi u **pobuđenom stanju** energije  $E_n$ , pod djelovanjem polja može prijeći u niže energijsko stanje, Kažemo da primijenjeno elektromagnetsko polje "izbacuje" atom iz ekscitiranog stanja, tj.

Iz višeg energijskog stanja atom može prijeći u niže stanje pod utjecajem polja ili spontano, a pri tome zrači kvant energije  $h\nu$ .

Takva teorijska predviđanja poslije su eksperimentalno zapažena, pa je, primjerice, ustanovljena negativna apsorpcija (tj. pojačanje) vidljive svjetlosti u živinim parama pri električnom izboju.

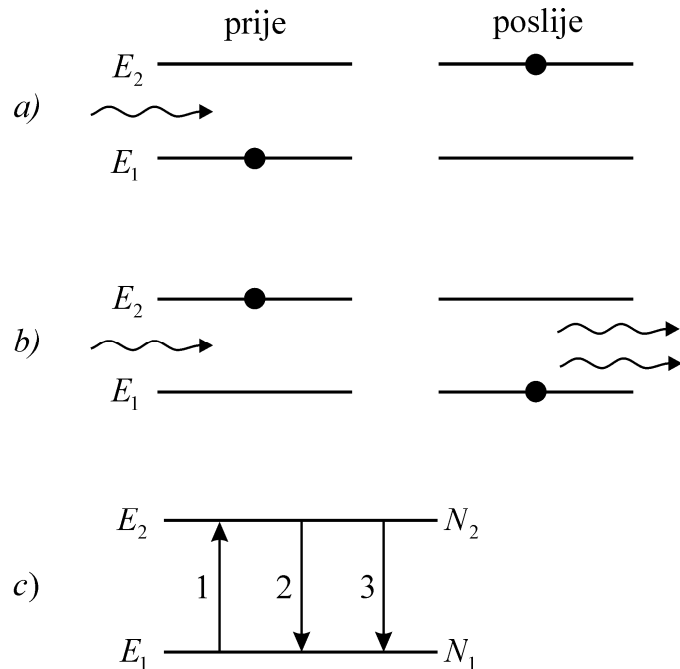


## Laseri 4

Pri stimuliranoj emisiji *upadno zračenje mora imati ista svojstva kao ekscitirano zračenje.*

Svaki novi foton (koji nastaje u atomu kad elektron skoči iz višeg u niže energijsko stanje pod djelovanjem upadne svjetlosti) ima istu energiju i isti smjer gibanja kao i upadni foton.

Stimuliranom emisijom svjetlost se pojačava u aktivnom mediju: od jednog upadnog fotona nastaju dva fotona, ta dva fotona proizvode četiri,



a) apsorpcija upadnog kvanta energije u atomu;  
b) stimulirana emisija;

c) smjer skoka elektrona pri apsorpciji (1),  
spontanoj emisiji (2) i stimuliranoj emisiji  
kvanta energije (fotona).

## *Laseri 5*

Simbolima valne teorije  $\rightarrow$  Stimulirana se emisija sastoji u povećanju amplitude ulaznog (prolaznog) vala bez promjene u frekvenciji, smjeru gibanja, fazi i polarizaciji elektromagnetskog vala.

Kod normalnih uvjeta (termička ravnoteža)  $\rightarrow$  Broj atoma  $N_2$  u pobuđenom stanju ( $E_2$ ) je manji od  $N_1$ , tj.  $N_2/N_1 < 1$ ; tada je  $\alpha > 0$ .

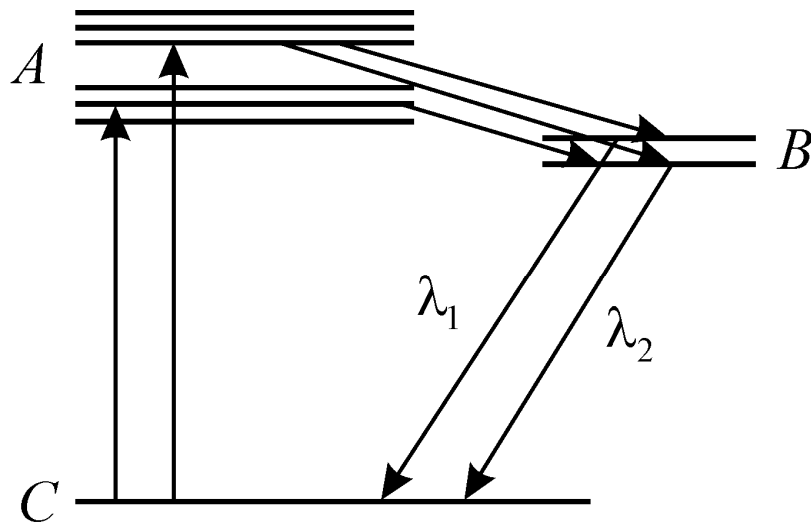
Da bi se dobio medij s negativnom apsorpcijom ( $\alpha < 0$ ), valja ga izbaciti iz ravnoteže, tj. napraviti odnos  $N_2/N_1 > 1$ , tzv. **populacijska inverzija**.

Populacijska inverzija se može dobiti pomoću takozvane **optičke pumpe**.

## Laseri 6

**Rubinski laser** - Prvi izgrađeni laser. Koristio aktivni medij u čvrstom stanju s tri energijske razine (pojednostavljeno); laserski štap (10x1 cm) bio je izgrađen od rubinskog kristala, koji se može sintetizirati kao aluminijski oksid ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), s dodatcima oko 0,4 % krom oksida ( $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ), gdje ioni  $\text{Cr}^{3+}$  zamjenjuju ponegdje atom aluminijski u kristalnoj rešetki.

U rešetki takvog rubina inducirani se prijelazi događaju u ionima kroma koji uz osnovno stanje C imaju dvije više energijske vrpce A i nižu dvostruku razinu B:



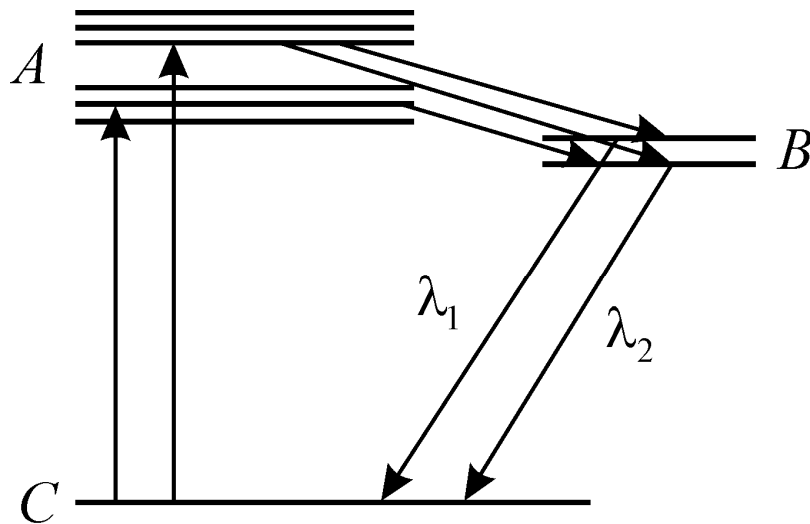
Prijelazi iz B u C odgovaraju emisiji crvenog svjetla s valnim duljinama  $\lambda_1 = 692,7 \text{ nm}$  i  $\lambda_2 = 694,3 \text{ nm}$ .



## *Laseri 7*

Princip rada: Rubin osvjetlimo jakim zelenom svjetlošću iz bljeskalice (punjene s neonom i kriptonom), što predstavlja optičku pumpu. → Ioni kroma prelaze iz osnovnog stanja C na razinu A, iz koje bez zračenja (energija se prenosi na rešetku kao toplina) prelazi s najvećom vjerojatnosti u stanje B. → U B veća populacija nego u stanju C. → Populacijska inverzija.

Spontani prijelaz iz B u C ima malu vjerojatnost.



## *Laseri 8*

Plinski laseri: U pravilu, populacijska inverzija može biti rezultat neelastičnih sudara između elektrona i atoma pri električnom izboju. Ipak, tu je pobuđeno stanje obično vrlo kratkotrajno i atomi se spontano vraćaju u stabilno, normalno stanje. To se može izbjeći, dijelom, ako se plinu dodaju pogodne molekule kao onečišćenje, pa više energijske razine imaju veću populaciju elektrona.

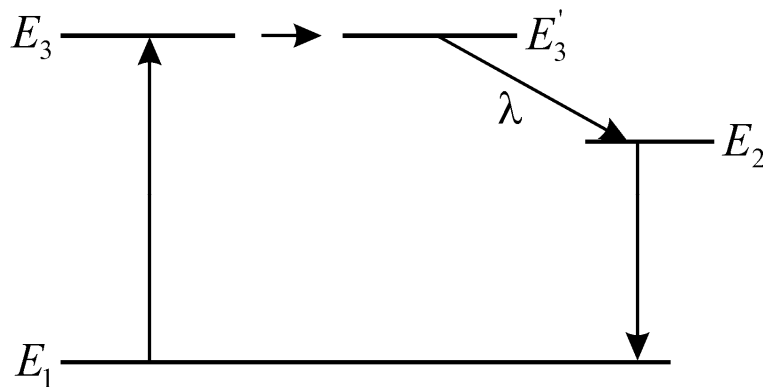
Plinski laser He – Ne → Populacijska se inverzija postiže pri električnom izboju u smjesi helija i neona (u odnosu 10:1, kod tlaka od oko 100 Pa).

## *Laseri 9*

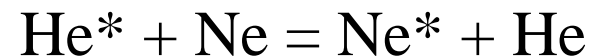
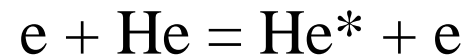
Plinski laser He – Ne → Populacijska se inverzija postiže pri električnom izboju u smjesi helija i neona (u odnosu 10:1, kod tlaka od oko 100 Pa).

Atomi helija (He) se pobuđuju u sudaru s elektronima (e) i dolaze u metastabilno stanje  $E_3$  (Energijske su vrpce pojednostavljeno prikazane jednom razinom.).

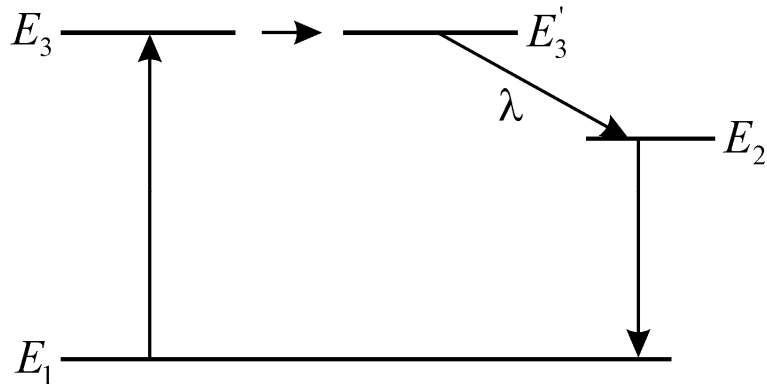
U neelastičnom srazu s ekscitiranim atomima helija ( $\text{He}^*$ ), atomi neona (Ne) također prelaze u pobuđeno stanje ( $\text{Ne}^*$ ) s energijskom razinom  $E_3'$  (gdje je dostignuta populacijska inverzija), koja je blizu razini pobuđenog helija ( $E_3' \approx E_3$ ).



Matematički:



## *Laseri 10*



Prijelaz atoma neona iz razine  $E_3'$  u  $E_2$  ima značenje stimulirane emisije svjetlosti valne duljine  $\lambda = 632,8 \text{ nm}$ , (crvenu laserska svjetlost).

Prijelaz atoma iz  $E_2$  u osnovno stanje  $E_1$  odvija se obliku difuznog predavanja energije stjenkama posude.

Pripadne energijske razine imaju približne vrijednosti:

$$E_1 = 0;$$

$$E_3 \cong 20 \text{ eV};$$

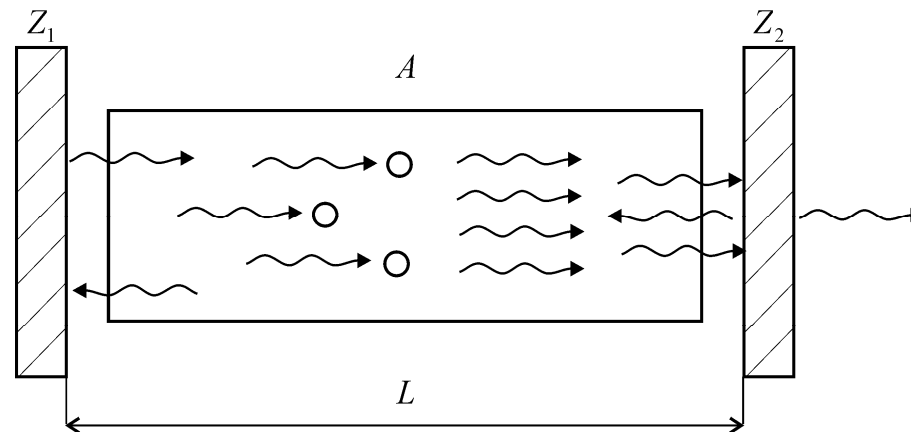
$$E_3' - E_2 = 1,96 \text{ eV}.$$

U cijevi lasera He – Ne električni izboj se postiže pod naponom od 1-2 kV, sa snagom električnog napajanja od 5 -10 W; snaga izlaznog snopa laserske svjetlosti je od 1 do 50 mW

## *Laseri 11*

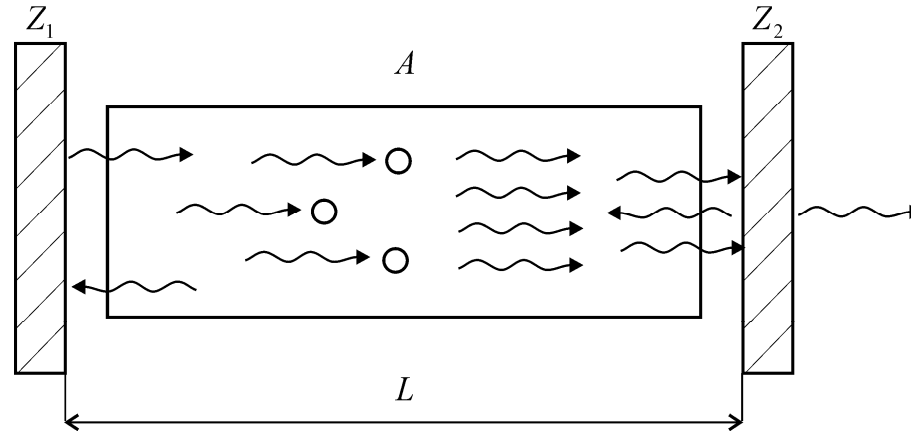
Pojačanje svjetlosti pri stimuliranoj emisiji može biti dalje povećano prolaskom svjetlosti kroz aktivni element više puta prije nego laserski snop bude izbačen iz medija.

Snop svjetlosti se nalazi u optičkoj šupljini, što je tzv. rezonantna šupljina, koja se sastoji od dva ravna ili konkavna zrcala, između kojih je smješten laserski štapić ili plinska cijev.



Svaki foton optičke pumpe u laserskom štapiću može služiti kao "starter" za lasersko djelovanje. Dio lavine prolazi kroz polupropusno zrcalo, a dio se reflektira i pojačava u aktivnom mediju, itd., što se ponavlja.

## *Laseri 11*



Granica pojačanja snopa određena je tzv. laserskim zasićenjem, koje zavisi o broju atoma laserskog elementa u pobuđenom stanju.

## *Laseri 12*

Pojačanje laserskog snopa, odnosno vremenske promjene intenziteta laserske svjetlosti, dobro opisuje tzv. logistička ili populacijska jednačina, sljedećeg oblika:

$$x_{n+1} = rx_n (1 - x_n)$$

$x_n$  = Intenzitet snopa nakon n-tog prolaza kroz optičku šupljinu.

$r$  = tzv. kontrolni parametar. Ima značenje brzine porasta laserskog snopa i određen je svojstvima aktivnog medija. Općenito,  $0 < r < 4$ .

Kada je varijabla  $x$  normalizirana i pokazuje relativne vrijednosti s obzirom na najveću vrijednost promatrane veličine (ovdje, intenziteta snopa svjetlosti), te je  $0 < x_n < 1$ .

Kod većih brzina porasta laserskog snopa, ili za  $r > 3,5$  rješenja logističke jednačine postaju sasvim nepredvidiva i intenziteti izlaznog laserskog snopa pokazuju u vremenu niz nepravilnih i neprekazivih vrijednosti; to je pojava tzv. *determinističkog kaosa* (vezan uz nelinearne dinamičke i disipativne sustave).

## *Laseri 13*

Jezik valne teorije: Lasersko zračenje je koherentno s ekscitirajućim zračenjem.

Pojačanje svjetlosti u laseru predstavlja povećanje valne amplitude.

Stoga je važno da val koji se vraća u neku točku aktivnog elementa ima istu fazu kao izvorni val za bilo koji broj refleksija na zrcalu.

To znači da odnos između valne duljine svjetlosti ( $\lambda$ ) i dužine laserskog elementa ( $L$ ) mora biti cijeli broj, tj. treba uspostaviti odnos:  $2L = n\lambda \rightarrow L = n\lambda/2$ ;  $n = 1, 2, \dots$ ; oznaka  $2L$  odnosi se na put vala između dvije uzastopne refleksije.  $\rightarrow$

Primarni i sekundarni valovi interferiraju konstruktivno (pojačavaju se), a tako raste i rezultatna amplituda.  $\rightarrow$

Svjetlost koja izlazi iz lasera proizvedena je konstruktivnom interferencijom od mnogo koherentnih valova koji se razlikuju u fazi za višekratnik od  $2\pi$ .  $\rightarrow$

Laser ima vrlo veliku amplitudu i izvanredno veliki intenzitet.



## *Laseri 14*

Optička šupljina se promatra kao rezonantna šupljina, ili rezonator, duljine  $L$  na kojoj je smješteno  $n$  stojnih valova.  $L = n\lambda/2 \rightarrow$

Pripadna rezonantna frekvencija:  $\nu_n = nc / 2L$

Laseri daju snop monokromatske svjetlosti velike snage i male angularne divergencije, što je pogodno u mnogim primjenama.

Laserska svjetlost se primjenjuje u komunikaciji, za detekciju mete, za mjerenje udaljenosti i za oslobađanje velike topline u sićušnom volumenu pa laserski snop prodire s malom rupom u tvrde materijale ili mikroskopske dijelove tkiva (npr. liječenje retine oka).

Rubinski laser dostiže snagu snopa od 10 kW na 1 cm<sup>2</sup>.

Laser s ugljik-dioksidom daje snažni impulsni snop s energijom od 1 kJ u 1ns, tj. snop postiže vršnu snagu od 10<sup>12</sup> W.

## *Laseri 15*

Poluvodički laseri - Populacijska inverzija postiže se pomoću stalnog električnog polja, koje usmjeruje elektrone i šupljine kroz poluvodički n-p-n spoj.

Laseri primjene: Od navođenja oružja do proizvoda široke potrošnje (npr. laserskim snopom se buše uske rupice na dječjim bočicama)

Laseri su postali nezamjenjivi u primjeni holografije i stvaranju 3D slika.

Proizvodnja kompaktnih ploča (CD) ili audio i video diskova, i dr.; laserskim snopom se postiže separacija u prirodnoj smjesi urana ( $^{235}\text{U}$  i  $^{238}\text{U}$ ) i obogaćuje prirodni uran izotopom  $^{235}\text{U}$  (laserom se pobuđuju atomi u plinovitom uran-fluoridu; određena frekvencija lasera ionizira jednu vrstu atoma nuklida urana koji se onda električnim poljem otklanjaju iz smjese).

Izvanredno jakim impulsnim laserskim snopom (npr.  $\text{CO}_2$  laser, vršne snage  $10^{14}$  W, u impulsu od 1s) zagrijava se smjesa deuterija i tricija, što omogućuje ostvarenje nuklearne fuzije u reaktoru (kratkotrajna fuzija se ponavlja desetak puta u sekundi).