

1. Osnovi kvantne mehanike

Kao što je dobro poznato, foton, kao nosilac elektromagnetnog polja, osim što se ponaša kao talas (poseduje talasna svojstva - kao primer za to spomenućemo difrakciju svetlosti, a svetlost je najpoznatiji predstavnik elektromagnetnih talasa), ponaša se i kao čestica (poseduje čestična svojstva - primer za to je Compton-ov efekat, koji pokazuju fotoni većih energija od fotona svetlosti). Zbog toga se kaže da foton ima dvojako ponašanje (talasno i čestično), tj. da je dualne prirode. Energija fotona posmatranog kao talas je:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad (1.1)$$

a kao čestica:

$$E = m_f c^2, \quad (1.2)$$

što predstavlja dobro poznati Ajnštajnov izraz za energiju relativističke čestice, gde su ν i λ frekvencija i talasna dužina fotona (talasa čiji je on nosilac), redom, m_f masa fotona, a c njegova brzina, koja ujedno predstavlja najveću moguću brzinu u prirodi (pošto je to i brzina svetlosti, ona je mnogo poznatija pod tim imenom). Ne postoji foton koji se nalazi u miru već samo kada se kreće i njegov impuls je

$$p_f = m_f \cdot c, \quad (1.3)$$

Na osnovu izraza (1.1), (1.2) i (1.3) sledi da se impuls fotona može predstaviti u obliku:

$$p_f = \frac{h}{\lambda}, \quad (1.4)$$

gde λ predstavlja talasnu dužinu fotona, a je h Plankova konstanta ($h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Js}$).

1.1 de Broljeva hipoteza

Na osnovu dualne prirode fotona, de Brolj (de Broglie) je postavio svoju hipotezu po kojoj sva tela poseduju dualnu prirodu: ponašaju se i kao čestice i kao talasi. To znači da se svakom telu mase m , koje se kreće brzinom v , može pridružiti jedan talas (tzv. de Broljev talas) čija se talasna dužina λ može odrediti iz izraza:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}, \quad (1.5)$$

gde je m masa kretanja tela (očigledno da je ovaj izraz sličan izrazu (1.4)). S obzirom da se masa tela (čestice) menja sa brzinom, što je dobro poznato iz relativističke fizike:

$$m = \frac{m_o}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (1.6)$$

onda se u slučaju relativističke čestice de Broljev izraz svodi na:

$$\lambda = \frac{h}{v} \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{m_o}. \quad (1.7)$$

Za česticu kažemo da je relativistička ako je njena brzina uporediva sa brzinom svetlosti $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$. U tom slučaju je ukupna energija relativističke čestice $E = mc^2$ (Ajnštajnov izraz za energiju relativističke čestice) jednaka zbiru njene energije mirovanja $E_o = m_o c^2$ i njene kinetičke energije E_k :

$$E = E_o + E_k = m_o c^2 + E_k, \quad (1.8)$$

a odavde je njena kinetička energija jednaka:

$$E_k = E - m_o c^2 = mc^2 - m_o c^2 = \frac{m_o c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - m_o c^2 = m_o c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right). \quad (1.9)$$

Kao što se može videti, kinetička energija relativističke čestice (relativistička kinetička energija) data izrazom (1.8) se razlikuje od dobro poznatog "klasičnog" (nerelativističkog) izraza za kinetičku energiju

$$E_k = \frac{mv^2}{2}, \quad (1.10)$$

gde je, s obzirom da se radi o nerelativističkoj čestici, zanemarena promena mase čestice sa brzinom, tj. važi da je masa mirovanja čestice m_o jednaka masi kretanja čestice m ($m_o = m$).

Da li postoji razlika između vrednosti kinetičke energije dobijene relativističkim izrazom (1.9) i nerelativističkim izrazom (1.10)? Uzmimo primer elektrona mase mirovanja $m_o = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$, koji se kreće brzinom od $v = 1 \times 10^6 \text{ m/s}$ (radi se o nerelativističkom elektronu, jer je njegova brzina za dva reda veličine manja od brzine svetlosti, tj. $v \ll c$). Ako se primeni relativistički izraz za kinetičku energiju (1.9) onda se dobija:

$$E_k = m_o c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) = 9.1 \times 10^{-31} \cdot 9 \times 10^{16} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{(10^6)^2}{(3 \times 10^8)^2}}} - 1 \right) = 2.84 \text{ eV}, \quad (1.11)$$

a ako se primeni nerelativistički izraz za kinetičku energiju (1.10) onda se dobija:

$$E_k = \frac{m_o v^2}{2} = \frac{9.1 \times 10^{-31} \cdot (10^6)^2}{2} = 2.84 \text{ eV}. \quad (1.12)$$

Kao što se može videti, dobija se ista vrednost za kinetičku energiju bez obzira na to da li se koristi relativistički ili nerelativistički izraz. To je i očekivano s obzirom da je nerelativistička fizika specijalni slučaj relativističke fizike kada je ispunjen uslov: $v \ll c$.

Koja je onda veza između relativističkog i nerelativističkog izraza za kinetičku energiju? Ako se krene od izraza (1.9), i pri tome se posmatra nerelativistička čestica koja se kreće brzinom v koja je mnogo manja od brzine svetlosti c ($v \ll c$), onda se član $\sqrt{1 - (v^2/c^2)}$ može razviti u red, tako da se dobija:

$$E_k = m_o \cdot c^2 \left(\left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} - 1 \right) \approx m_o \cdot c^2 \left(1 + \frac{v^2}{2c^2} + \dots - 1 \right) = \frac{m_o v^2}{2} \quad (1.13)$$

pri čemu, pošto se radi o nerelativističkom slučaju ($v \ll c$), važi: $m_o \approx m$.

Nadjimo sada talasnu dužinu de Brojjevih talasa (tzv. de Brojjevu talasnu dužinu) u sledećim slučajevima:

1) Posmatrajmo čoveka mase $m = 70 \text{ kg}$ koji se kreće brzinom $v = 1 \text{ m/s}$ (3.6 km/h). Pošto i on, kao i svako drugo telo, poseduje talasna svojstva, talasna dužina talasa koji mu je pridružen iznosi: $\lambda = h/(mv) = 6.62 \times 10^{-34}/(70 \cdot 1) = 9.4 \times 10^{-36} \text{ m}$. Očigledno da je vrednost talasna dužine de Brojjevih talasa u ovom slučaju zanemarljiva, a samim tim se i talasna svojstva posmatranog tela (čoveka) mogu zanemariti.

2) Posmatrajmo sada elektron mase $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ koji se kreće brzinom $v = 1 \times 10^6 \text{ m/s}$ (reč je o nerelativističkom elektronu za koji važi: $m \approx m_o$). Talasna dužina talasa koji mu je pridružen iznosi:

$\lambda = h/(mv) = 6.62 \times 10^{-34}/(9.1 \times 10^{-31} \cdot 10^6) = 7.72 \times 10^{-10} m$. Očigledno da se talasna dužina de Brojjevih talasa u slučaju elektrona ne može zanemariti (sa smanjenjem brzine talasna dužina raste).¹

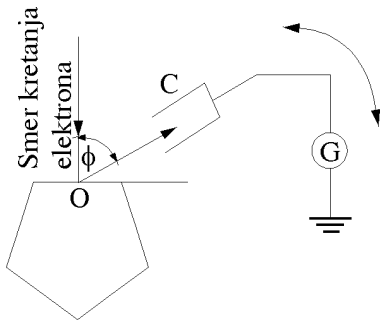
Na osnovu ova dva primera se može izvesti generalni zaključak o granici primene kvantne mehanike, koja je opštija i klasične mehanike koja je sadržana u kvantnoj mehanici (kaže se da je klasična mehanika specijalni slučaj kvantne mehanike). Očigledno da je granični uslov, kada se sa kvantne prelazi na klasičnu mehaniku, upravo onaj koji je vezan sa talasnim svojstvom čestice (tela). Naime, ukoliko talasna dužina de Brojjevih talasa teži nuli ($\lambda \rightarrow 0$) onda se sa kvantne prelazi na klasičnu mehaniku.

Pošto čestica za koju se, po de Brojju, očekuje da poseduje talasna svojstva mora da pokazuje difrakciju, to je iskorišćeno za proveru de Brojjeve hipoteze. Na slici (1.1) je prikazan eksperiment pomoću koga je je proveravana difrakcija elektrona na kristalu nikla, i na taj način potvrđeno njihovo talasno svojstvo. Kristal nikla je upotrebljen zbog toga što je rastojanje u njegovoj kristalnoj rešetki bilo reda veličine talasne dužine upadnih elektrona, što je uslov za pojavu difrakcije. Inače, u to vreme je bila poznata difrakcija rendgenskih (X-) zraka na kristalu natrijum-hlorida. Do difrakcije na kristalnoj rešetki dolazi ako je ispunjen Wulf-Bragov uslov za difrakciju (na slici (1.2) je prikazan dvodimenzioni izgled kubične strukture kristalne rešetke):

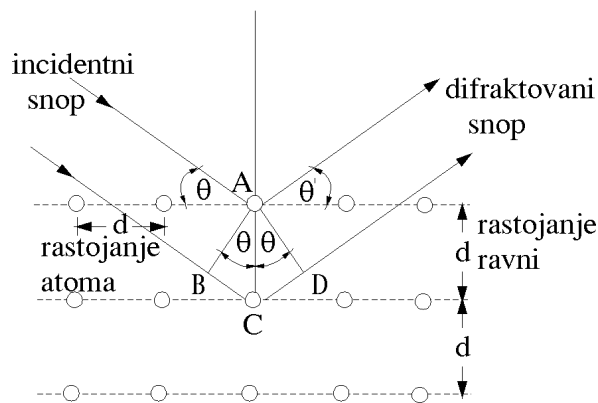
$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin\theta, \quad (1.14)$$

gde je d rastojanje izmedju čvorova (atoma, jona,...) u kristalnoj rešetki, n ceo broj, λ talasna dužina upadnih talasa (X-zraka, elektrona, ...), a θ ugao izmedju upadnog snopa talasa i difrakcione ravni (ravni u kojoj se nalaze čvorovi rešetke).

Eksperiment prikazan na slici (1.1) je omogućavao promenu upadnog ugla i energije elektrona (a samim tim i promenu brzine i de Brojjeve talasne dužine elektrona), kao i merenje struje elektrona u pojedinim tačkama prostora. Za pojedine vrednosti upadnog ugla i talasne dužine elektrona, koje su odgovarale Wulf-Bragovom uslovu datom izrazom (1.14), dobijane su maksimalne, odnosno minimalne vrednosti struje elektrona, koje su odgovarale difrakcionim maksimumima i minimumima.



Sl. 1.1: Uredjaj za proveru difrakcije elektrona na kristalu.



Sl. 1.2: Difrakcija talasa na kristalu.

1.2 Osobine de Brojjevih talasa

Neka se mikročestica mase m kreće brzinom v . Potrebno je da se za ovakvu česticu izračuna fazna i grupna brzina de Brojjevih talasa. Prema klasičnoj talasnoj teoriji fazna brzina v_f de Brojjevih talasa je

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}. \quad (1.15)$$

¹Treba praviti razliku izmedju talasne dužine elektrona, posmatranog kao talas, i talasne dužine fotona, posmatranog kao talas. U slučaju fotona, energija fotona raste sa smanjenjem njegove talasne dužine, jer za njega važi izraz (1.1), dok to nije slučaj kod elektrona pošto za njega taj izraz ne važi. Korišćenjem izraza (1.1) se npr. dobija da su radio talasi mnogo manje opasni po čovekovo zdravlje nego mikrotalasi zbog toga što imaju mnogo veću talasnu dužinu, a samim tim i mnogo manju energiju od miktrotalasa.

Pošto je $c > v$ može se zaključiti da je fazna brzina uvek veća od brzine svetlosti u vakuumu. Ovo pokazuje da fazna brzina nije povezana sa brzinom kretanja tela, jer prema teoriji relativnosti brzine veće od brzine svetlosti nisu moguće.

Prema klasičnoj talasnoj teoriji grupna brzina može se izračunati na sledeći način:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}. \quad (1.16)$$

Iz teorije relativnosti proizilazi da je ukupna energija slobodne čestice

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}, \quad (1.17)$$

Diferenciranjem ovog izraza po p dobija se

$$\frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} = \frac{mvc^2}{mc^2} = v. \quad (1.18)$$

Prema tome grupna brzina de Brojjevih talasa jednaka je brzini čestice.

S obzirom da i mikročestice ispoljavaju dualističku prirodu činjeni su napor da se povežu njihova talasna sa korpuskularnim svojstvima. Međutim, ti napor nisu urodili plodom. Naime, mikrošetice ne može da bude ravan monohromatski talas, pošto je takav talas neograničen, a čestica je lokalizovana u prostoru i vremenu, tj. u odredjenom trenutku zauzima odredjeno mesto u prostoru. Zato se došlo na ideju da se mikročestica razmatra kao talasni "paket" koji se sastoji od velikog broja talasa čiji se talasni brojevi veoma malo medjusobno razlikuju i koji može biti ograničen na proizvoljno mali prostor. Da li se mikročestica može posmatrati kao talasni paket? Izgledalo bi da ovakva hipoteza nalazi svoju potvrdu u osobini de Brojjevih talasa da je njihova grupna brzina (brzina kojom se pomera maksimum talasnog paketa) jednak brzini čestice. Međutim, prikazivanje čestice pomoću talasnog paketa pokazalo se neodrživim, jer se talasni paket pri kretanju u disperzivnoj sredini brzo "rasplinjava" (za vreme od 10^{-26} s), ili se pak razlaže na više talasnih paketa.

1.3 Relacije neodredjenosti

S obzirom da čestice pored čestičnih (korpuskularnih) poseduju i talasna svojstva, pokazano je da za njih ne važe zakoni klasične fizike. Po klasičnoj mehanici za proučavanje kretanja nekoga tela dovoljno je poznavati njegov položaj u prostoru (koordinate) i komponente impulsa u odredjenom trenutku, ili tzv. jednačinu kretanja tela koja povezuje ove veličine. Takodje je iz klasične mehanike poznato da se ove veličine mogu u datom trenutku izmeriti sa dovoljnom tačnošću, što omogućava da se putanja i impuls čestice u poznatom polju sila može u potpunosti odrediti.

Hajzenberg (Heisenberg) je, uzimajući u obzir dualnu prirodu čestica, došao do zaključka da se čestici ne mogu istovremeno tačno odrediti koordinate (x, y, z) i komponente impulsa (p_x, p_y, p_z) koje odgovaraju tim koordinatama. Prema Hajzenbergu proizvodi apsolutnih grešaka (neodredjenosti) tih veličina moraju da zadovoljavaju sledeće uslove:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \hbar. \quad (1.19)$$

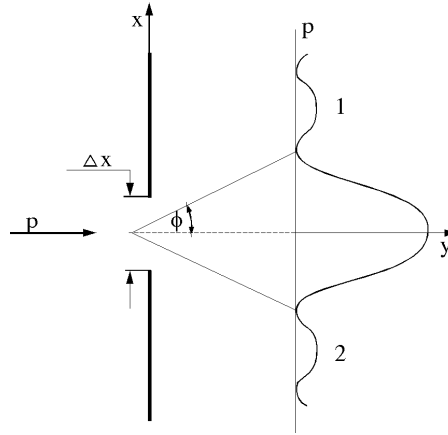
Iz prvog uslova neodredjenosti, na primer, proizilazi da kada se čestica nalazi u stanju sa tačno odredjenom vrednošću koordinate ($\Delta x = 0$) onda je za to stanje odgovarajuća komponenta impulsa praktično potpuno neodredjena ($\Delta p_x = \infty$) i obrnuto.

Sada je potrebno pokazati da princip neodredjenosti zaista proizilazi iz talasnih osobina čestica. U tom će se cilju posmatrati sledeći ogled sa elektronima kao najtipičnijim predstavnicima kvantnih čestica (sl. 1.3). Snop upadnih elektrona pada na otvor širine Δx koji je normalan na pravac kretanja snopa, i pri tome je njegova dimenzija reda veličine talasne dužine de Brojjevih talasa elektrona. Pošto elektroni pored čestičnih ispoljavaju i talasna svojstva, pri prolasku kroz otvor oni skreću sa svog prvobitnog pravca (nastupa

difrakcija). Na fluorescentnom zaklonu P se dobije difrakciona slika u obliku glavnog maksimuma, koji je simetričan u odnosu na y -osu, i bočnih manjih maksimuma sa obe strane od glavnog maksimuma (na slici 1.3 manji maksimumi su označeni brojevima 1 i 2). Pre prolaska kroz otvor elektroni su se kretali duž y -ose, pa je komponenta njihovih impulsa u pravcu x -ose bila jednaka nuli ($p_x = 0$), a u pravcu y -ose: $p_y = p$.

Uočimo sada elektrone koji su skrenuli pod uglom ϕ koji odgovara prvom difrakcionom minimumu na sl. 1.3. Sa slike se može videti da je promena impulsa Δp_x tih elektrona u pravcu x -ose:

$$\Delta p_x = p \sin \phi \quad \Rightarrow \quad \sin \phi = \frac{\Delta p_x}{p}. \quad (1.20)$$



Sl. 1.3: Difrakcija snopa elektrona pri prolasku kroz otvor širine Δx .

Iz teorije difrakcije je poznato da se uslov za pojavu prvog difrakcionog minimuma ($n = 1$) na otvoru širine Δx (difrakcija na jednom otvoru) može izraziti kao:

$$\Delta x \sin \phi = \lambda \quad \Rightarrow \quad \sin \phi = \frac{\lambda}{\Delta x}. \quad (1.21)$$

Iz izraza (1.20) i (1.21), posle eliminisanja ugla ϕ , sledi:

$$\frac{\Delta p_x}{p} = \frac{\lambda}{\Delta x} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta p_x = p\lambda, \quad (1.22)$$

a koristeći de Brojjev izraz (1.5): $p\lambda = h$, dobija se:

$$\Delta x \Delta p_x = h = 2\pi\hbar \geq \hbar, \quad (1.23)$$

što je u saglasnosti sa prvom Hajzenbergovom relacijom neodređenosti za koordinate (1.19).

Nemogućnost da se istovremeno odredi koordinata i njoj odgovarajuća komponenta impulsa nije posledica nesavršenosti metode merenja ili mernog instrumenata već je to posledica specifičnosti čestica da istovremeno raspolažu čestičnim i talasnim svojstvima, zbog čega se na njima ne mogu primeniti zakoni klasične fizike. Relacije neodređenosti, pored ostalog, omogućavaju da se oceni u kojoj meri mogu da se primene zakoni klasične mehanike na kvantne čestice.

Prva relacija u izrazu (1.19) može se napisati i u obliku:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \Delta x \cdot m \cdot \Delta v_x \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{m}, \quad (1.24)$$

odakle sledi da ukoliko je masa čestice manja, utoliko je neodređenost njene koordinate i brzine veća. To je i razlog što su kvantne čestice malih masa (zbog toga su one nazvane **mikročestice**). Sa druge strane, ukoliko je masa čestice veća, utoliko je neodređenost njene koordinate i brzine manja, pa se sa velikom

tačnošću može na nju primeniti pojam trajektorije (zakoni klasične fizike). To se može pokazati na sledećem primeru:

Ako je za zrno prašine mase $m = 10^{-12} \text{ kg}$ i prečnika $d = 1 \mu\text{m}$ neodredjenost u njegovom položaju 1% od dimenzije njegovog prečnika, odrediti neodredjenost u njegovoj brzini koja odgovara ovoj vrednosti neodredjenosti položaja.

Na osnovu datog uslova: neodredjenost u položaju (koordinati) zrna je 1% od dimenzije prečnika d , može se zaključiti da se radi o maloj neodredjenost u njegovom položaju (ono je dobro lokalizovano u prostoru): $\Delta x = 1\% d = 0.01 \cdot d = 0.01 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 10^{-8} \text{ m}$. Sa druge strane se korišćenjem relacije (1.24) za neodredjenost njegove brzine dobija $\Delta v_x = 6,62 \cdot 10^{-14} \text{ ms}^{-1}$, što je jako mala vrednost. Ovo je još jedan pokazatelj da se kod makrotela sa dovoljnom tačnošću može istovremeno izmeriti koordinata i brzina tela, tj. da kod njih talasna svojstva ne igraju bitnu ulogu.

Interesantno je primeniti relaciju neodredjenosti na elektron koji se kreće u atomu vodonika. Neka je neodredjenost koordinate elektrona $\Delta x = 10^{-10} \text{ m}$ (reda prečnika samog atoma, tj. smatra se da je elektron u sastavu atoma). Prema (1.19) neodredjenost njegove brzine je $\Delta v_x \approx 7,2 \cdot 10^6 \text{ ms}^{-1}$. Iz zakona klasične fizike može se pokazati da je pri kretanju elektrona oko jezgra po kružnoj orbiti poluprečnika $r \approx 5 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ njegova brzina $v \approx 2,3 \cdot 10^6 \text{ ms}^{-1}$. Prema tome, neodredjenost brzine je nekoliko puta veća od same brzine. Ovo pokazuje da se ne može govoriti o kretanju elektrona u atomu po tačno definisanim putanjama, što znači da za opisivanje kretanja elektrona u atomu ne važe zakoni klasične fizike (elektron se ponaša kao jedna mikročestica).

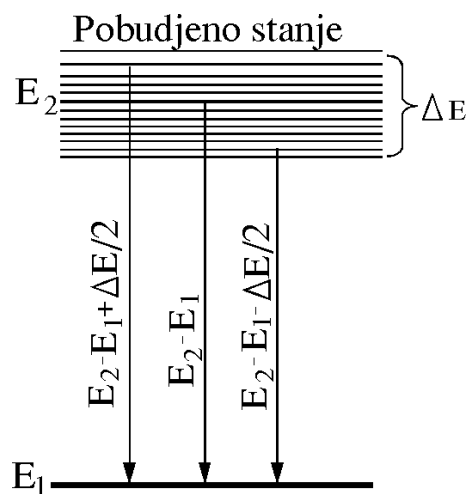
Hajzenbergove relacije neodredjenosti (1.19) negiraju mogućnost određivanja putanje mikročestice. To znači da Borova teorija o kruženju elektrona oko jezgra atoma po tačno određenim putanjama, u okviru kvantne mehanike gubi smisao. Zbog toga se umesto Borovog klasičnog objašnjenja za stabilnost atoma mora uvesti kvantnomehaničko tumačenje.

U kvantnoj mehanici se pored relacija (1.19) koristi i relacija neodredjenosti za energiju i vreme, a neodredjenost tih veličina mora da zadovolji sledeći uslov:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar, \quad (1.25)$$

gde je Δt vremenski interval u kojem mikročestica ima energiju $E \pm \Delta E$.

Izraz (1.25) omogućava pravilno objašnjenje energetske stanja u atomu. Elektron ostaje beskonačno dugo u osnovnom stanju sa energijom E_1 (sl. 1.4), jer ne može da predje na niži nivo. U tom slučaju je $\Delta t = \infty$, a $\Delta E = 0$. Znači, energetski nivo osnovnog stanja E_1 nema širinu, tj. nema neodredjenosti u energiji (sl. 1.4). Ako se elektron nalazi na višim energetskim nivoima, situacija je sasvim drugačija.



Sl. 1.4: Uz objašnjenje relacije neodredjenosti za energiju i vreme.

Neka sada elektron ima energiju E_2 , koja je veća od energije E_1 , tj. nalazi se u pobudjenom stanju sa energijom E_2 (drugačije rečeno, nalazi se na energetskom nivou E_2), i neka je τ srednje vreme života koje

odgovara tom pobudjenom stanju. Vreme boravka τ elektrona na energetskom nivou E_2 dovodi, na osnovu relacije (1.25), do neodredjenosti energije nivoa:

$$\Delta E_2 \geq \frac{\hbar}{\tau}, \quad (1.26)$$

koja je utoliko veća ukoliko je srednje vreme života pobudjenog stanja atoma kraće. To je i razlog što se pri prelasku elektrona iz pobudjenog stanja E_2 u osnovno stanje E_1 (sl. 1.4) emituje zračenje koje umesto jedne diskretne talasne dužine ima niz veoma bliskih talasnih dužina, a to se i ogleda u cepanju spektralnih linija. Prema tome, spektralna linija ima neku konačnu širinu koja se naziva prirodna širina.

1.4 Talasna funkcija

Eksperimentalna potvrda de Brojjeve ideje o univerzalnosti čestično - talasnog dualizma, ograničenost primene klasične mehanike na mikročestice (elektrone, jezgra, atome, molekule), podčinjavanje mikročestica relacijama neodredjenosti, kao i niz eksperimenata izvršenih početkom 20 veka, doveli su do formiranja savremene teorije nazvane kvantna mehanika. Ona je razvijena zahvaljujući istraživanjima de Brojja, Ha-jzenberga, Šredingera (Schrodinger), Diraka (Dirac) i drugih.

Neophodnost da se mikročestice opisuju preko verovatnoće je najbitnija karakteristika kvantne teorije. Zbog svoje talasne prirode, kao i relacija neodredjenosti, koje proizilaze iz nje, nemoguće je mikročesticu (kvantnu česticu) posmatrati u klasičnom smislu. Naime, u slučaju klasične čestice, jednačina kretanja date čestice potpuno može da opiše njen položaj i impuls (energiju) u datom trenutku vremena. Bez obzira na to što kvanta čestica to ne dozvoljava, javila se potreba da se ipak uvede neka funkcija, koja bi sadržala talasna svojstva mikročestice, a koja bi bila deo neke jednačine, čije rešenje bi trebalo da posluži za nalaženje verovatnoće nalaženja mikročestice, kao i njene energije (kasnije je postavljena Šredingerova jednačina koja je to i omogućila). Kao posledica te težnje uvedena je tzv. *talasna funkcija* $\Psi(x, y, z, t)$. Medjutim, pokazalo se da ona nema fizički smisao, već da fizički smisao ima njen kvadrat modula, i da je on srazmeran verovatnoći nalaženja čestice W :

$$W \sim |\Psi(x, y, z, t)|^2. \quad (1.27)$$

Verovatnoća nalaženja čestice u elementu zapremine dV je data izrazom:

$$dW = |\Psi|^2 dV, \quad (1.28)$$

gde veličina

$$|\Psi|^2 = \frac{dW}{dV} \quad (1.29)$$

predstavlja gustinu verovatnoće. Na taj način, opisivanje stanja mikročestice pomoću talasne funkcije ima statistički (verovatni) karakter: kvadrat modula talasne funkcije (kvadrat amplitude de Brojjevih talasa) određuje verovatnoću nalaženja čestice u trenutku t u oblasti sa koordinatama x i $x + dx$, y i $y + dy$, z i $z + dz$. To je u saglasnosti sa kvantnom mehanikom koja je zasnovana na statističkom karakteru pojava.

Dakle, fizički smisao nema sama funkcija Ψ već kvadrat njenog modula $|\Psi|^2 = |\Psi\Psi^*|$ koji određuje intenzitet de Brojjevih talasa (Ψ^* je konjugovano-kompleksna funkcija funkcije Ψ). Na taj način je stanje mikročestice u kvantnoj mehanici opisano pomoću talasne funkcije kao osnovnim nosiocem informacija kako njenih čestičnih, tako i njenih talasnih svojstava.

Verovatnoća nalaženja čestice u zapremini V u trenutku t , saglasno teoremi o složenoj verovatnoći, data je izrazom:

$$W = \int_V dW = \int_V |\Psi|^2 dV. \quad (1.30)$$

Pošto $|\Psi|^2 dV$ predstavlja verovatnoću, neophodno je talasnu funkciju Ψ normirati tako da je ukupna verovatnoća nalaženja čestice u celom prostoru jednaka 1, tj. jednaka 100%. Prema tome, uslov normiranja talasne funkcije se može napisati u sledećem obliku:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1, \quad (1.31)$$

gde se trostruki integral u izrazu (1.31) izračunava po beskonačnom prostoru, tj. po koordinatama x, y, z od $-\infty$ do ∞ .

Da bi talasna funkcija odražavala objektivnu karakteristiku stanja mikročestice, ona mora da zadovolji nekoliko uslova: da bude konačna (verovatnoća ne može biti veća od jedinice), jednoznačna (verovatnoća ne može biti višeznačna veličina) i neprekidna (verovatnoća se ne može menjati skokovito).

1.5 Šredingerova jednačina

Statistička tumačenja de Brojjevih talasa i Hajzenbergove relacije neodređenosti pokazala su da jednačina u kvantnoj mehanici, koja opisuje kretanje mikročestice u polju sila, mora opisivati istovremeno i njena talasna svojstva. Prema tome, osnovu jednačine mora činiti talasna funkcija $\Psi(x, y, z, t)$ ili veličina $|\Psi|^2$. Pošto tražena jednačina mora uzimati u obzir talasna svojstva čestice ona mora biti talasna jednačina slična jednačini koja opisuje elektromagnetne talase.

Osnovnu jednačinu nerelativističke kvantne mehanike dao je Šredinger, po kome je ona i dobila ime (Šredingerova jednačina). Kao i sve osnovne jednačine u fizici (Njutnova jednačina u klasičnoj mehanici, Maksvelova jednačina za elektromagnetna polja.), Šredingerova jednačina se ne izvodi već se postavlja, a njenu ispravnost potvrđuju eksperimentalni rezultati.

Šredingerova jednačina se može izraziti na sledeći način:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x, y, z, t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad (1.32)$$

gde je m masa mikročestice, Δ Laplasov (Laplace) operator ($\Delta\Psi = \partial^2\Psi/\partial x^2 + \partial^2\Psi/\partial y^2 + \partial^2\Psi/\partial z^2$), i imaginarna jedinica, a $U(x, y, z, t)$ potencijalna energija čestice u polju sila u kome se ona kreće. Pošto se radi o nerelativističkoj Šredingerovoj jednačini ona važi za bilo koju kvantnu česticu koja se kreće brzinom v mnogo manjom od brzine svetlosti c ($v \ll c$).

Jednačina (1.32) predstavlja opšti oblik Šredingerove jednačine zavisne od vremena (to je tzv. Šredingerova nestacionarna jednačina), i ona je u matematičkom smislu parcijalna diferencijalna jednačina drugog reda. Treba još jednom istaći da se Šredingerova jednačina ne može izvesti već se postulira. Ispravnost ove jednačine potvrđuju eksperimentalni rezultati što joj u prvom redu daju karakter zakona prirode.

Za mnoge fizičke pojave u mikrosvetu jednačina (1.32) se može uprostiti ako se uzme da je talasna funkcija Ψ nezavisna od vremena. Ovo je moguće učiniti ako je polje u kojem se mikročestica kreće stacionarno, tj. funkcija $U = U(x, y, z)$ ne zavisi od vremena i ima smisao potencijalne energije. Na taj način se dobija jednačina:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0, \quad (1.33)$$

koja predstavlja Šredingerovu jednačinu za stacionarno stanje i prosto se naziva Šredingerova jednačina.

U jednačini (1.33) figuriše parametar ukupna energija čestice E . U teoriji diferencijalnih jednačina je pokazano da ova jednačina ima rešenje samo za određene vrednosti E . Ove vrednosti energije se nazivaju svojstvene vrednosti. Rešenja Šredingerove jednačine koja odgovaraju svojstvenim vrednostima energije nazivaju se svojstvene funkcije. Svojstvene vrednosti E mogu biti kako kontinualne tako i diskretne. U prvom slučaju govori se o neprekidnom ili kontinualnom spektru, a u drugom slučaju o diskretnom ili linijskom spektru.

Ako se posmatra jednodimenzioni slučaj, kada polje u kome se čestica kreće je jednodimenziono, $U(x)$, onda se prelazi na jednodimenzionu Šredingerovu jednačinu koja opisuje kretanje čestice duž jednog pravca:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0. \quad (1.34)$$

Za mnoge realne slučajeve oblik potencijalne energije ili nije poznat ili je jako komplikovan, tako da se ne može naći analitičko, već samo numeričko rešenje Šredingerove jednačine.

1.6 Primeri rešavanja Šredingerove jednačine

1.6.1 Kretanje slobodne čestice

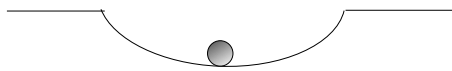
Pri kretanju slobodne čestice, na koju nema uticaja polja, njena ukupna energija je jednaka kinetičkoj energiji. Ako se čestica kreće duž x-ose Šredingerova jednačina za stacionarno stanje ima oblik

$$\frac{\partial \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (1.35)$$

Rešenje je $\psi(x) = A \exp(ikx)$ sa svojstvenom vrednošću energije $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$. U ovom sličaju slobodna čestica može imati proizvoljne vrednosti energije, tj energetska spektar je kontinualan.

1.6.2 Čestica u potencijalnoj jami beskonačne dubine

Posmatrajmo jedan klasičan slučaj koji se odnosi na kuglicu u jami (slika 1.5). Ukoliko se kuglica dovede do ruba jame i pusti, onda će se ona kretati unutar ove jame i ne postoji način da je ona napusti. Kažemo da je kuglica "zarobljena" u ovoj jami i da ona može da se kreće samo unutar nje. Ako bi se kuglici, dovedenoj na rub jame, saopštila neka početna brzina onda bi ona mogla da napusti jamu. Očigledno da je u ovom slučaju klasične fizike kuglica i fizički (prostorno) i energetska zarobljena u jami.



Sl. 1.5: Telo u slučaju klasične jame kada je ono fizički (prostorno) i energetska zarobljeno.

U kvantnoj mehanici pod potencijalnom jamom podrazumeva se prostor u kome se mikročestica može slobodno kretati. Ovaj prostor je ograničen poljem koje ne dozvoljava mikročestici da ga napusti.

Jedan od idealizovanih slučajeva, za koji je moguće naći analitičko rešenje Šredingerove jednačine, je kretanje čestice u potencijalnoj jami beskonačno visokih zidova, za koju potencijalna energija ima oblik:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 \leq x \leq \ell \\ \infty, & x > \ell \end{cases}$$

gde je ℓ širina jame, a energija se računa od njenog dna (sl. 1.6). Pretpostavićemo da se mikročestica (elektron) kreće duž x-ose.

Šredingerova jednačina za ovaj jednodimenzioni slučaj je:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \quad (1.36)$$

Iz uslova zadatka (beskonačno visoki zidovi) proizilazi da čestica ne može napustiti oblast jame. Prema tome verovatnoća nalaženja čestice (a time i talasna funkcija) za oblast van jame jednaka je nuli. Na granicama jame (pri $x = 0$ i $x = \ell$), zbog neprekidnosti talasne funkcije, vrednost ψ jednaka je nuli. Dakle, granični uslovi u ovom slučaju su

$$\psi(0) = \psi(\ell) = 0. \quad (1.37)$$

U oblasti jame ($0 \leq x \leq \ell$) Šredingerova jednačina (1.36) se svodi na jednačinu oblika

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0, \quad (1.38)$$

gde je

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (1.39)$$

Opšte rešenje diferencijalne jednačine (1.38) može se napisati u sledećem obliku:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx. \quad (1.40)$$

Iz uslova $\psi(0) = 0$ se dobija:

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow 0 = A \sin 0 + B \cos 0 = B \Rightarrow B = 0, \quad (1.41)$$

tako da talasna funkcija, koja je rešenje Šredingerove jednačine (1.38), dobija oblik:

$$\psi(x) = A \sin kx. \quad (1.42)$$

Uslov $\psi(\ell) = A \sin k\ell = 0$ je ispunjen samo kada je $k\ell = n\pi$, gde je n ceo broj:

$$k = \frac{n\pi}{\ell}. \quad (1.43)$$

Iz izraza (1.39) i (1.43) sledi:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2}, \quad (1.44)$$

tj. da je Šredingerova jednačina, koja opisuje kretanje slobodne čestice u potencijalnoj jami sa beskonačno visokim zidovima, zadovoljena samo za svojstvene vrednosti E_n koje zavise od celog broja n . Prema tome, energija E čestice u potencijalnoj jami sa beskonačno visokim zidovima ne može biti proizvoljna, već ima diskretne vrednosti (kvantovana je). Kvantovana vrednost energije E_n naziva se energetska nivo, a broj n koji određuje energetska nivo naziva se kvantni broj. Ovo pokazuje da se mikročestica u potencijalnoj jami sa beskonačno visokim zidovima može nalaziti samo na određenim energetskim nivoima tj. u određenim kvantnim stanjima n .

Zamenom vrednosti za k iz (1.43) u (1.42) dolazi se do izraza za svojstvenu funkciju:

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{\ell} x. \quad (1.45)$$

Integraciona konstanta A određuje se iz uslova normiranja (1.31) koji se za dati slučaj može napisati u obliku

$$A^2 \int_0^\ell \sin^2 \frac{n\pi}{\ell} x dx = 1. \quad (1.46)$$

iz kojeg se dobija da je $A = \sqrt{2/\ell}$, tako da svojstvena funkcija ima oblik

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{n\pi}{\ell} x, \quad (1.47)$$

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

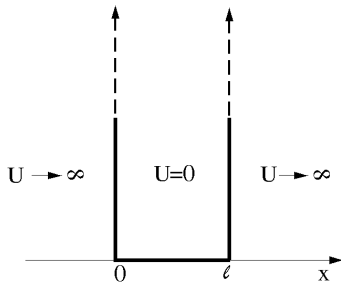
Grafici svojstvenih funkcija 1.7 koje odgovaraju energetskim nivoima (1.44) za $n = 1, 2$, i 3 prikazani su na slici (1.7.a). Na slici 1.7.b prikazane su gustine verovatnoća nalaženja čestice u unutrašnjosti jame ($|\psi_n(x)|^2$) za $n = 1, 2$ i 3 . Sa slike se vidi da se, na primer, u kvantnom stanju sa $n = 2$ čestica ne može naći u sredini jame, dok se levo i desno od sredine može naći sa jednakom verovatnoćom. To pokazuje da se predstava o trajektoriji čestice, koja važi za klasičnu mehaniku, u kvantnoj mehanici ne može koristiti.

Iz izraza (1.44) sledi da je razlika između dva energetska nivoa jednaka:

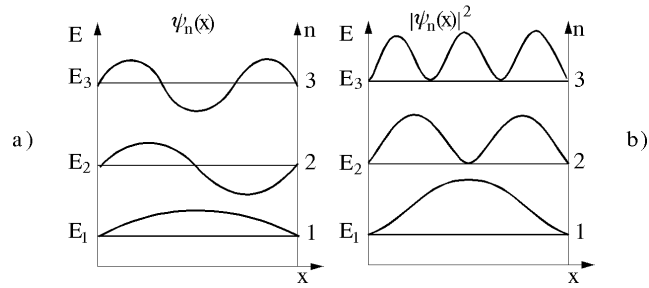
$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} [(n+1)^2 - n^2] = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} (2n+1). \quad (1.48)$$

Uzmimo dva primera:

1) Elektron u jami dimenzije $\ell = 10^{-1} m$ (slobodan elektron u metalu), $\Delta E_n \approx n \cdot 1,2 \times 10^{-35} J = n \cdot 7,4 \cdot 10^{-15} eV$, tj. energetska nivoi su raspoređeni na tako bliskim rastojanjima da se spektar energije praktično može smatrati kontinualnim, što odgovara realnoj situaciji slobodnih elektrona u metalu.



Sl. 1.6: Jednodimenzionalna potencijalna jama sa beskonačno visokim zidovima.



Sl. 1.7: a) Svojstvene funkcije i b) gustine verovatnoće nalaženja čestice u unutrašnjosti jame za $n=1,2$ i 3 .

2) Ako je dimenzija jame reda veličine dimenzije atoma ($\ell \approx 10^{-10} \text{ m}$) onda za elektrone u atomu važi $\Delta E_n \approx n \cdot 1,2 \times 10^{-17} \text{ J} = n \cdot 7,4 \times 10^2 \text{ eV}$, tj. dobijaju se izrazito diskretne vrednosti spektra (to potvrđuje i dobijeni linijski spektar).

Može se zaključiti da primena Šredingerove jednačine na česticu u potencijalnoj jami sa beskonačno visokim zidovima dovodi do kvantovane vrednosti energije. Klasična mehanika ne postavlja nikakva ograničenja u energiji koju može imati mikročestica.

Iz izraza (1.44) i (1.48) proizilazi da za veće vrednosti kvantnih brojeva ($n \gg 1$) važi: $\Delta E_n/E_n \approx 2/n \ll 1$, tj. susedni energetske nivoi su utoliko bliži jedan drugome ukoliko je n veće. Ako je n veoma veliko onda se praktično može govoriti o kontinualnom energetskom spektru. To znači da pri velikim vrednostima n zakoni kvantne mehanike prelaze u zakone klasične fizike.

1.6.3 Atom vodonika i sistemi slični njemu

Energetski nivo atoma vodonika, kao i sistema sličnih njemu (helijum jedamput jonizovan, litijum dva puta jonizovan itd) u kvantnoj mehanici se razmatraju svodjenjem problema na kretanje elektrona u kulonovskom polju atomskog jezgra. Potencijalna energija $U(r)$ elektrona u polju jezgra, tj. pri njegovom kretanju po datoj orbitali može se izraziti na sledeći način:

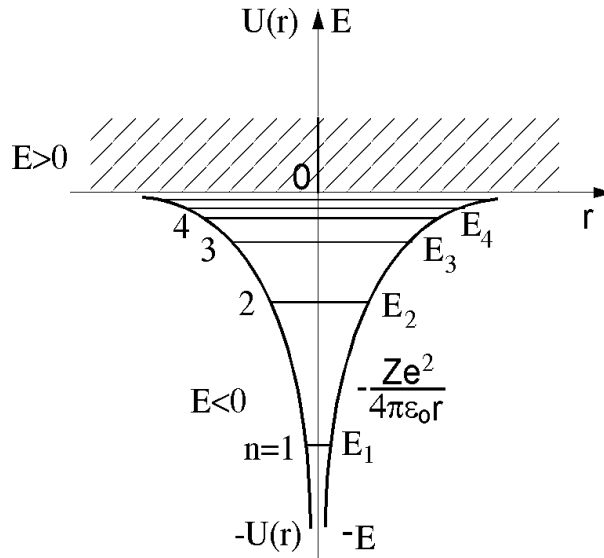
$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (1.49)$$

gde je r rastojanje između jezgra i elektrona, a Z atomski broj (za atom vodonika $Z = 1$), i ona je jednaka radu koji mora da se izvrši da bi se elektron prebacio sa date orbite u beskonačnost, tj. na dovoljno veliko rastojanje gde ne oseća dejstvo jezgra (ovaj proces je poznat pod nazivom jonizacija atoma).

Na slici 1.8 je data kriva zavisnosti potencijalne energije elektrona U od udaljenosti r od jezgra. Kao što se može videti, atom vodonika se može predstaviti jamom (ovde se ta jama zove potencijalna jama) beskonačne dubine koja se dobija rotacijom krive potencijalne energije U oko ose E koja prolazi kroz jezgro. Elektron se nalazi unutar ove jame, i poseduje negativnu potencijalnu energiju koja teži beskonačnosti kada r teži nuli, a postaje jednaka nuli kada r teži beskonačnosti (što odgovara slučaju jonizacije atoma). Negativna vrednost potencijalne energija pokazuje da je u pitanju vezano stanje.

Pošto elektron u atomu ima stalnu energiju (stacionarno stanje), njegovo kretanje se može opisati Šredingerovom jednačinom koja je vremenski nezavisna (jednačina (1.33) uzimajući za potencijalnu energiju izraz (1.49)). Jednačina (1.33) važi za slučaj kada se kretanje razmatra u Dekartovom pravouganom (x,y,z) koordinatnom sistemu. Pošto je polje u kome se kreće elektron centralno simetrično, pogodno je koristiti sferni koordinatni sistem (za detalje videtu knjigu M. Pejović, OPŠTI KURS FIZIKE - kvantna mehanika, atomska i statistička fizika, fizika čvrstog stanja, nukleaena fizika i elementarne čestice, III izdanje, Izd. Elektronski fakultet Univerziteta u Nišu, 1999). Ako se koristi sferni koordinatni sistem talasna funkcija ψ koja zavisi od r , θ i φ se može predstaviti kao proizvod tri talasne funkcije od kojih svaka zavisi samo od jedne koordinate sfernog koordinatnog sistema, tj.

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (1.50)$$



Sl. 1.8: Elektron koji se kreće po svojoj orbitali u atomu vodonika je energetske zarobljen u kvantnoj (potencijalnoj) jami jezgra. Oznake E_1, E_2, E_3, \dots predstavljaju energetske nivoe atoma.

Radijalni deo talasne funkcije $R(r)$ opisuje promenu verovatnoće nalaženja elektrona na rastojanju r od jezgra atoma za konstantnu vrednost θ i ϕ . Sferni deo talasne funkcije $Y(\theta, \phi)$ opisuje promenu talasne funkcije na površini sfere poluprečnika r u čijem se centru nalazi jezgro atoma.

Ako se pretpostavi da talasna funkcija $\psi(r, \theta, \phi)$ zavisi samo od koordinate r može se pokazati da rešenje Šredingerove jednačine za osnovno stanje atoma vodonika ima oblik

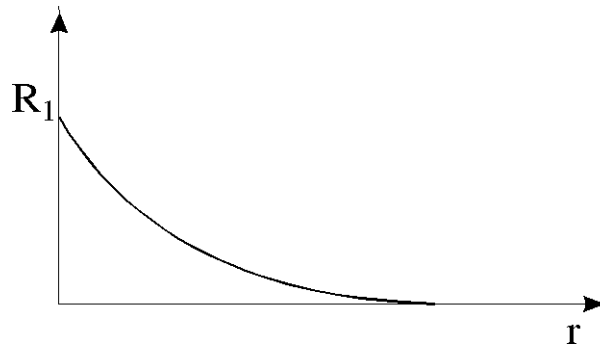
$$R_1(r) = \exp(-ar), \quad (1.51)$$

dok je ukupna energija osnovnog stanja atoma vodonika i sistemima sličnim njemu

$$E = -\frac{Zme^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}. \quad (1.52)$$

Ovaj izraz je isti sa izrazom za energiju atoma vodonika u osnovnom stanju dobijen iz Borove teorije.

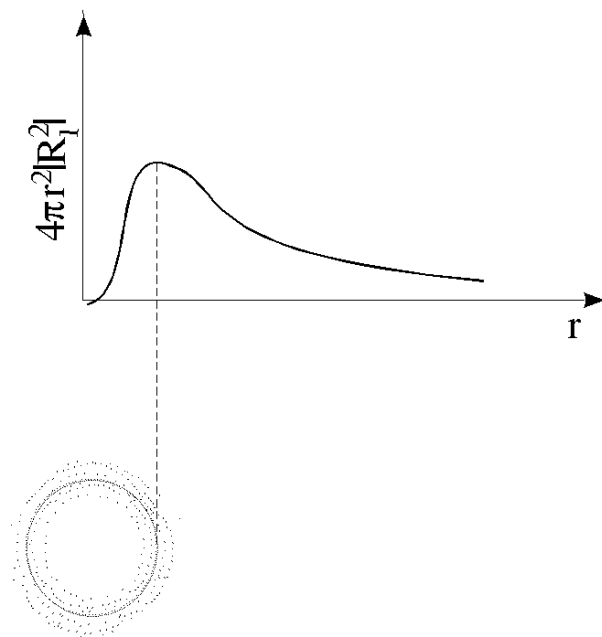
Radijalni deo talasne funkcije $R_1(r)$ za osnovno stanje atoma vodonika je prikazan na slici 1.9.



Sl. 1.9: Radijalni deo talasne funkcije za osnovno stanje atoma vodonika.

Verovatnoća nalaženja elektrona u okolini neke tačke prostora određena je sa $|R|^2 dV$, gde je dV element zapremine. Da bi se odredila verovatnoća nalaženja elektrona u nekom delu prostora oko atomskog jezgra,

treba postaviti jezgro u koordinatni početak, a prostor oko njega izdeliti na niz koncentričnih slojeva debljine dr . Svaki takav sloj ima zapreminu $4\pi r^2 dr$, gde je r rastojanje posmatranog sfernog sloja oko jezgra. Verovatnoća nalaženja elektrona u svakom pojedinačnom sloju dobija se kada se $|R|^2$ pomnoži zapreminom sloja, tj. $4\pi r^2 |R|^2 dr$. Funkcija $4\pi r^2 |R|^2$ je poznata pod nazivom funkcija raspodele verovatnoće ili radijalna gustina. Na slici 1.10 prikazana je radijalna gustina za osnovno stanje atoma vodonika (za podnivo $1s$).



Sl. 1.10: Radijalna gustina za osnovno stanje atoma vodonika.

S obzirom na veliku brzinu elektrona i raspodelu njegove verovatnoće nalaženja, prostor u kome se elektron kreće deluje kao negativno naelektrisani oblak, tzv. oblak verovatnoće (takodje prikazano na slici 1.10). Može se shvatiti da tačke predstavljaju snimljene položaje trenutnog nalaženja elektrona. Na taj način raspored tačaka predstavlja slikovit prikaz oblika verovatnoće, odnosno oblaka negativnog naelektrisanja za jedan elektron. Kao što se može zapaziti za osnovno stanje ($1s$ podnivo) verovatnoća nalaženja elektrona je najveća, odnosno najveća je gustina elektronskog oblaka na rastojanju $r_1 \approx 53 \text{ nm}$, što odgovara prvom Borovom radijusu. Medjutim, dok se prema Borovoj teoriji elektron može naći samo na rastojanju r_1 , na osnovu kvantno-mehaničkog tumačenja elektron se može naći i na rastojanju $r \neq r_1$, ali sa manjom verovatnoćom. Za prvo pobudjeno stanje ($2s$ podnivo) funkcija radijalne gustine ima dva maksimuma itd.

1.7 Potencijalna barijera

Kao i u slučaju jame, i ovde postoji razlika izmedju barijere u klasičnom i kvantnom smislu. Klasična mehanika podrazumeva da telo pri kretanju zaista nailazi na prepreku koja mu onemogućava dalje kretanje i ono može proći kroz nju samo ako poseduje dovoljnu energiju. U kvantnom smislu, kada se kaže da čestica nailazi na barijeru, onda to u opštem slučaju ne znači da ona nailazi na fizičku prepreku, već da ulazi u oblast dejstva određenog fizičkog polja, koje svojom silom deluje na nju, tako da je potrebno da čestica poseduje određenu energiju da bi savladala silu dejstva. Zato se kaže da je čestica naišla na potencijalnu barijeru. Za razliku od klasične fizike koja to ne dozvoljava, u kvatnoj fizici je moguće da čestica savlada potencijalnu barijeru iako je njena energija manja od visine barijere. Taj proces se naziva tunelovanje čestice kroz potencijalnu barijeru, i verovatnoća za ovaj proces je uvek veća od nule.

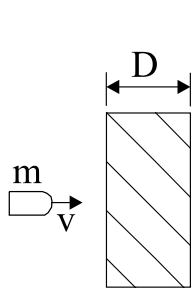
Uočimo najpre jedan klasičan primer prikazan na sl. 1.11. Dat je metak mase m koji se kreće brzinom v prema dasci debljine D i udara u nju. Pri kretanju kroz dasku javlja se otporna sila, i da bi je metak savladao potrebno je da on poseduje određenu vrednost kinetičke energije, koja je jednaka ili veća od potencijalne

energije koja potiče od sile otpora u dasci. U suprotnom metak neće moći da savlada potencijalnu barijeru (dasku), i zaustaviće se u njoj. Očigledno da klasična mehanika podrazumeva fizičko postojanje prepreke, a koja je to ujedno i u energetskom smislu (predstavlja i potencijalnu prepreku za telo, u ovom slučaju za metak).

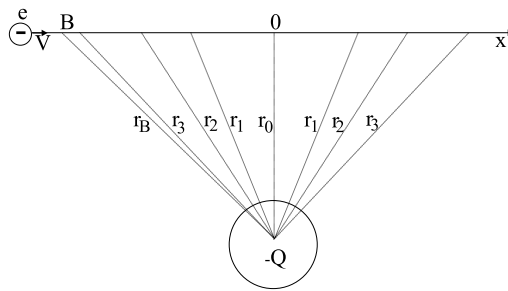
Drugi primer se odnosi na kretanje elektrona. Uočimo sl. 1.12 na kojoj je prikazano kretanje elektrona u polju negativno naelektrisanog tela $-Q$. Postavlja se pitanje kada će elektron da savlada dejstvo odbojne sile i da predje iz tačke B, koja se nalazi na rastojanju r_B od naelektrisanja $-Q$, u tačku 0, koja se nalazi na rastojanju r_0 . Pretpostavićemo da je u pitanju sferno, homogeno naelektrisano telo, tako da se u tom slučaju ono može aproksimirati tačkastim naelektrisanjem. Očigledno da je pri kretanju između tačaka B i 0 potrebno da telo savlada rad odbojne električne sile (rad u električnom potencijalnom polju). Pošto je električna sila konzervativna sila, a to su sile čiji rad ne zavisi od vremena, brzine i oblika putanje, već samo od početnog i krajnjeg položaja tela, onda kao i u slučaju rada u gravitacionom polju, rad u električnom polju ne zavisi od oblika putanje tela već samo od njegovog početnog i krajnjeg položaja. Može se pokazati da je rad između tačaka B i 0 dat izrazom

$$A = \frac{|Q|e}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_0} - \frac{1}{r_B} \right), \quad (1.53)$$

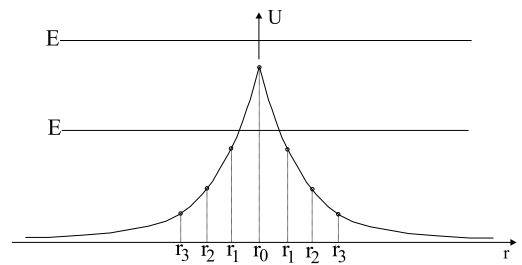
To znači da će u klasičnom smislu elektron da predje rastojanje između tačaka B i 0 samo ako je njegova ukupna energija veća od rada A, kada je u mogućnosti da savlada dejstvo električnog potencijalnog polja.



Sl. 1.11:



Sl. 1.12:



Sl. 1.13:

Sl. 1.11 Barijera u klasičnom smislu predstavlja fizičku prepreku za telo. Ona je ujedno i energetska (potencijalna) barijera, koju telo ne može da savlada ukoliko nema dovoljnu energiju.

Sl. 1.12 Kretanje elektrona u polju dejstva negativnog naelektrisanja $-Q$. Ovo predstavlja slučaj potencijalne, a ne i fizičke prepreke (barijere).

Sl. 1.13 Mogući oblik potencijalne barijere koja potiče od tačkastog naelektrisanja $-Q$, a koju elektron treba da savlada na svom putu. Verovatnoća za ovaj proces je u kvantnom smislu uvek veća od nula, bez obzira na energiju elektrona.

Tokom kretanja elektrona u električnom polju koje potiče od tačkastog naelektrisanja $-Q$, u svakoj tački putanje elektron "oseća" dejstvo polja izraženo kroz vrednost "električne potencijalne energije" u toj tački. Potencijalna energija za svaku tačku fizičkog (u ovom slučaju električnog) polja, koja se nalazi na rastojanju r od tačkastog naelektrisanja $-Q$, odgovara radu koji bi se izvršio pri prebacivanju elektrona iz te tačke u beskonačnost:

$$U(r) = \frac{|Q|e}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (1.54)$$

Na osnovu izraza (1.54) moguće je naći vrednost potencijalne energije za rastojanja r_0 , r_1 , r_2 i r_3 prikazana na sl. 1.12. Ove vrednosti su prikazane na sl. 1.13, na kojoj je dat moguć oblik krive potencijalne

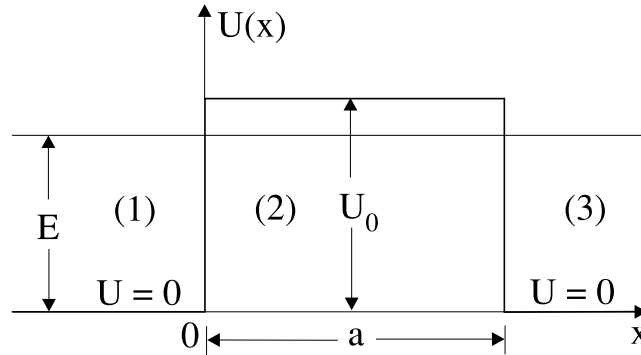
energije. Dobijena kriva predstavlja moguć oblik potencijalne barijere za ovaj slučaj, i da bi je elektron, u klasičnom smislu, savladao potrebno je da ima energiju veću od vrha potencijalne barijere.

U slučaju kvantne mehanike, ako se elektron posmatra kao talas, može se pokazati da postoji određena verovatnoća da elektron savlada potencijalnu barijeru iako nema dovoljnu energiju za taj proces. Sa energetskog stanovišta to znači da je elektron tunelovao kroz potencijalnu barijeru određene širine (širina barijere zavisi od mesta gde elektron tuneluje kroz nju, tj. od njegove energije), i ovaj proces se naziva tunelski efekat.

1.7.1 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru

Ovde je dat primer pravougaone potencijalne barijere za koju treba izračunati verovatnoću tunelovanja, tj. verovatnoću da je čestica savlada u slučaju kada je njena energija manja od visine potencijalne barijere. Ovo je jedan od prostijih oblika potencijalne barijere za koji se može naći analitičko rešenje Šredingerove jednačine.

Neka se čestica (elektron) kreće s leva na desno duž x-ose i na svom putu nailazi na potencijalnu barijeru pravougaonog oblika visine U i širine ℓ (sl. 1.14). Prema klasičnoj fizici, ako je energija čestice veća od energije potencijalne barijere ($E > U$) čestica će nesmetano proći iznad barijere. Ako je energija čestice manja od energije potencijalne barijere ($E < U$), kao što je to prikazano na slici 1.14, čestica se odbija od barijere i vraća nazad.



Sl. 1.14: Oblik pravougaone potencijalne barijere.

Sa gledišta kvantne mehanike, čak i kada je $E > U$ postoji verovatnoća različita od nule da se čestica odbije od barijere. Takodje pri $E < U$ postoji izvesna verovatnoća da čestica prodje kroz barijeru i da se nadje u oblasti 3 (verovatnoća za tunelski proces je veća od nule). Ovakvo ponašanje čestice, koje je sa gledišta klasične fizike nemoguće, se takodje dobija kao rešenje Šredingerove jednačine.

Oblik potencijalne barijere, prikazane na sl. 1.14, je:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U, & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

Šredingerova jednačina za oblast 1 i 3 ima oblik

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} + k^2\psi_{1,3} = 0, \quad (1.55)$$

gde je $k^2 = 2mE/\hbar^2$.

Šredingerova jednačina za oblast 2 ima oblik

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + q^2\psi_2 = 0, \quad (1.56)$$

gde je

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U). \quad (1.57)$$

Za opisivanje tunelskog efekta uvodi se pojam koeficijenta tunelovanja (transmisije, transparentije) D kroz potencijalnu barijeru. Rešavanjem Šredingerovih jednačina za oblasti I, II i III može se doći do koeficijenta tunelovanja kroz pravougaonu potencijalnu barijeru:

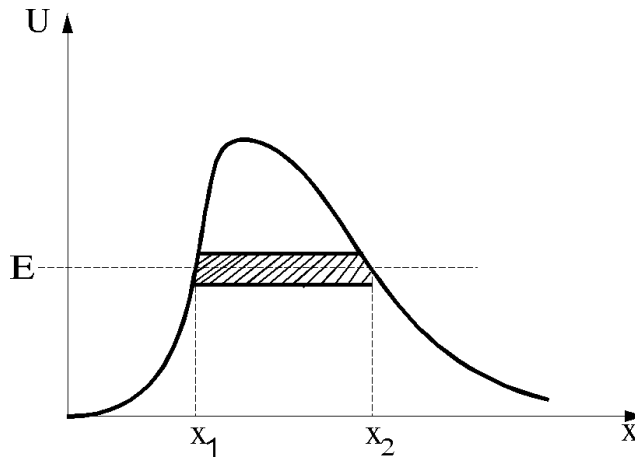
$$D \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\ell\right] \quad (1.58)$$

Iz izraza (1.58) vidi se da ukoliko je barijera šira, utoliko je verovatnoća prolaženja čestice kroz nju manja.

Za potencijalnu barijeru oblika prikazanog na slici 1.15 koeficijent tunelovanja je:

$$D \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U-E)}dx\right], \quad (1.59)$$

gde je $U = U(x)$.



Sl. 1.15: Proizvoljan oblik potencijalne barijere.

Sa tačke gledišta klasične fizike prolaženje čestice kroz potencijalnu barijeru pri $E < U$ suprotno je zakonu održanja energije, jer bi čestica u "tunelu" morala da ima negativnu kinetičku energiju E_k . Naime, pošto je u tunelu $(U - E) > 0$, a $E = E_k + U$, sledi da je $U - E_k - U > 0$, tj. $E_k < 0$, tj. $E_k < 0$, što klasična fizika ne dozvoljava. Međutim, tunel efekat je zapažen u mnogim oblastima fizike i tehnike. Na primer, u nuklearnoj fizici emisija α -čestice, pri raspadu jezgra, vrši se zahvaljujući tunel efektu. Tunelski efekat je našao primenu u poluprovodničkim tehnologijama kod tunelske diode i kvantnih tranzistora.

1.7.2 Pojave vezane za tunel efekat

Emisija α -čestice iz jezgra

U okviru kursa Opšta fizika je naglašeno da i pored toga što α čestica ima energiju manju od potencijalne barijere jezgra ona čim se stvori u jezgro napušta ga. Ovo se ne može objasniti zakonima klasične fizike. Jedino zadovoljavajuće objašnjenje daje kvantna mehanika. Na osnovu tunel efekta (za detalje videti knjigu M.M. Pejović, OPŠTI KURS FIZIKE - kvantna mehanika, atomska i statistička fizika, fizika čvrstog stanja, nuklearna fizika i elementarne čestice, III izd. Elektronski fakultet Univerziteta u Nišu, 1999)

Tunel dioda

Još 1958. godine Esaki je objavio rad u kome je pokazao da jedan deo strujno-naponske karakteristike $p - n$ spoja sa jako dopiranim p i n oblastima pokazuje karakteristiku negativne otpornosti (sl. 1.16).

Na slici 1.16 je ispekidanom linijom takodje dat oblik strujno naponske karakterisikte "klasične" diode (diode čije oblasti nisu jako dopirane). Za razliku od nje, struja tunelske diode najpre raste, dostižući svoj

maksimum, a zatim opada do minimuma, da bi nakon toga opet rasla, poklapajući se sa strujno-naponskom karakterisitkom klasične diode.

Objašnjenje ove pojave se može naći u dijagramu energetskih nivoa tunelske diode (tzv. energetski dijagrami) koji obuhvataju vrh valentne zone (E_v) i dno provodne zone (E_c), a koji su prikazani na slikama 1.17 - 1.19. Razlog ovakve strujno-naponske karakteristike diode sa jako dopiranim oblastima je tunelovanje elektrona kroz zabranjenu zonu bez promene njihove energije, što je identično tunelovanju čestice kroz potencijalnu barijeru. Može se pretpostaviti da je reč o potencijalnoj barijeri trouganog oblika. Treba uočiti da Fermijev nivo, E_F , na strani p oblasti (p -tip poluprovodnika) leži ispod vrha valentne zone, a na strani n oblasti (n -tip poluprovodnika) leži iznad dna provodne zone, što je posledica veoma velike koncentracije donorskih i akceptorskih primesa.

Kada je dioda nepolarisana (sl.1.17) tada je ista verovatnoća da elektroni tuneluju iz valentne zone p -tipa poluprovodnika (p oblast) u provodnu zonu n -tipa poluprovodnika (n oblast), i obrnuto, i struja kroz p-n spoj je jednaka nuli.

Sa porastom napone direktne polarizacije p-n spoja (sl. 1.18) dolazi do zakrivljenja zona tako da se Fermijev nivo u n -tipu poluprovodnika pomera iznad Fermijevog nivoa u p -tipu. Kao posledica toga, elektroni sa energetskih nivoa u provodnoj zoni n -tipa, a koji se nalaze izmedju Fermijevih nivoa u n - i p -tipu i popunjeni su (jer su ispod Fermijevog nivoa n -tipa), mogu da tuneluju kroz zabranjenu zonu do nepopunjenih elektronskih centara zahvata u valentnoj zoni p -tipa (nepopunjenih energetskih nivoa), a koji su nepopunjeni zbog toga što se nalaze iznad Fermijevog nivoa. Proces tunelovanja elektrona dovodi do porasta struja kroz p-n spoj.

Kako dalje raste napon direktne polarizacije diode raste i struja kroz nju kao posledica sve većeg broja slobodnih (nepopunjenih) nivoa izmedju Fermijevog nivoa u p -tipu i Fermijevog nivoa u n -tipu, što omogućuje dalje tunelovanje elektrona iz provodne zone n -tipa do centara zahvata elektrona u valentnoj zoni p -tipa, i zahvatanje elektrona na njima.

Struja raste sa porastom polarizacije sve do trenutka kada se Fermijev nivo u n -tipu izjednači sa vrhom valentne zone u p -tipu, i tada struja dostiže svoju maksimalnu vrednost (tada je najveća razlika izmedju Fermijevih nivoa u n - i p -tipu poluprovodnika).

Sa daljim povećanjem polarizacije diode, Fermijev nivo poluprovodnika n -tipa se i dalje pomera naviše, ali sada se nalazi unutar zabranjene zone poluprovodnika p -tipa. Kao posledica toga, manje je centara zahvata u valentnoj zoni p -tipa na koje mogu da tuneluju elektroni iz n -tipa, i struja počinje da opada.

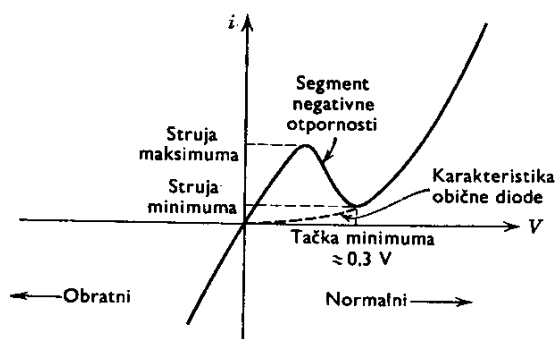
Dalji porast polarizacije dovodi do daljeg pada struje kroz diodu zbog toga što se dno provodne zone n -tipa dalje pomera naviše (Fermijev nivo n -tipa je i dalje unutar zabranjene zone p -tipa) smanjujući na taj način mogućnost elektronima da iz ove oblasti tuneluju u oblast p -tipa, tj. manje je slobodnih centara zahvata u p -tipu koji se nalaze iznad Fermijevog nivoa.

I konačno, kada je vrednost polarizacije tolika da se i Fermijev nivo n -tipa i dno provodne zone n -tipa nadju unutar zabranjene zone p -tipa (sl.1.19), onemogućeno je dalje tunelovanje elektrona iz n u p oblast, i vrednost struje je minimalna. Dalje povećanje struje sa povećanjem polarizacije nije posledica tunelovanja, već difuzije elektrona iz n u p oblast (kao u slučaju klasične diode, a strujno-naponska karakterisitika je ista kao i kod nje).

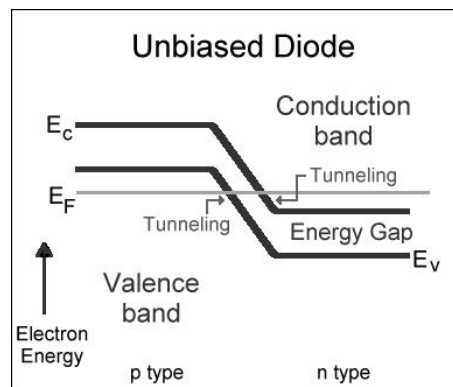
Kvantni tranzistor

Na bazi kvantnih jama projektovani su tzv. kvantni tranzistori sa efektom polja, koji su poznati pod različitim nazivima: HEMT (*high electron mobility transistor*), MODFET (*modulation doped FET*), TEGFET (*two-dimensional electron gas FET*), od kojih je prvi tip najpoznatiji. Oni se svi odnose na istu elektronsku komponentu, samo ukazuju na različite aspekte njenog funkcionisanja. Ideja da se struktura kvantne jame koristi kao tranzistor potekla je iz činjenice da se u ovim strukturama može postići pokretljivost nosilaca u ravni jame koja znatno prevazilazi pokretljivost u balku, mada samo na nižim temperaturama.

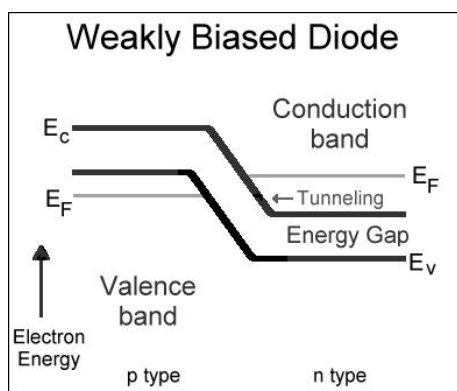
U poluprovodnicima, rasejanje elektrona, i konačno pokretljivost, zavisi od više mehanizama: rasejanja na fononima, na jonizovanim primesama (donorima), defektima rešetke, ne elektronima itd. Recipročne vrednosti pokretljivosti koje potiču od ovih mehanizama pojedinačno se sabiraju da bi se dobila ukupna



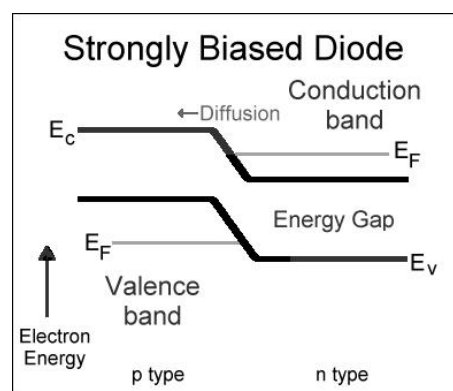
Sl. 1.16: Strujno-naponska karakteristika p-n spoja sa jako dopiranim oblastima. Isprekidana linija pokazuje oblik ove karakteristike kod diode kod koje p i n oblasti nisu jako dopirane ("klasična dioda").



Sl. 1.17: Pošto su oblasti p-n diode jako dopirane, Fermijev nivo u p oblasti je ispod vrha valenente, a u n oblasti iznad dna provodne zone. Slika pokazuje nepolarisani slučaj kada je struja kroz diodu jednaka nuli (ista je verovatnoća tunelovanja elektrona iz p u n oblast i obrnuto).



Sl. 1.18: Slučaj male polarizacije p-n spoja kada struja počinje da raste zbog pomeranja Fermijevih nivo, tako da postoje stanja u p oblasti koja su nepopunjena elektronima, a do kojih elektroni iz n oblasti mogu da tuneluju.



Sl. 1.19: Slučaj jake polarizacije, kada nema mogućnosti da elektroni iz n oblasti tuneluju u p oblast, i struja dostiže minimalnu vrednost (sva stanja u n -tipu između Fermijevog nivoa i dna provodne zone se nalaze unutar zabranjene zone n -tipa).

pokretljivost. Kod kvalitetnih (sa malim brojem defekata) i ne suviše jako dopiranih poluprovodnika na bazi III-IV jedinjenja dominantan uticaj na pokretljivost na nižim temperaturama ($\leq 100 K$), ima rasejanje na jonizovanim donorima (primesno rasejanje), a na višim temperaturama je dominantno rasejanje na optičkim fononima. Primesno rasejanje opada sa porastom temperature, a fononsko raste, pa postoji temperatura gde je pokretljivost maksimalna.

Pokretljivost u kvantnim jamama može znatno prevazići vrednost pokretljivosti u balku, ali samo ako primesno rasejanje dominantno određuje pokretljivost, što je slučaj na niskim temperaturama. Npr. u GaAs kvantnim jamama se može dobiti 20 puta veća pokretljivost nego u balku. Na višim temperaturama, gde je fononsko rasejanje dominantno, pokretljivost elektrona u kvantnoj jami samo je neznatno bolja nego u balku. Parametri FET-a kao što su npr. transkonduktansa ili brzina prekidanja rastu sa pokretljivošću elektrona (što je i bio razlog da se za klasične FET-ove počne koristiti GaAs umesto Si), pa i dalji razvoj prirodno ide u pravcu primene strukture kvantne jame.

Treba istaći da će se p - n spoj, diode i tranzistori proučavati u posebnom delu Fizika poluprovodnika, koji takodje čini sastavni deo kursa Fizička elektronika. Posle toga biće jasniji princip rada tunel diode i kvantnog tranzistora.