

SVEUČILIŠTE U RIJECI

FAKULTET ZA FIZIKU

**PREGLED FORMULA IZ MODERNE
FIZIKE I**

Robert Peter

Klaudija Lončarić

RIJEKA, 2023.

Sadržaj

1	Struktura atoma i fotonska priroda elektromagnetskog zračenja	1
1.1	Molekulski sastav tvari	1
1.2	Rutherfordov eksperiment	3
1.3	Bohrov model vodikovog atoma	4
1.4	Ioni slični vodiku	6
1.5	Rendgensko zračenje	6
1.6	Alkalni atomi	7
1.7	Struktura atoma	8
1.8	Višeelektronski sustavi	9
1.9	Zeemanov efekt	11
1.10	Fotoelektrični učinak	12
1.11	Comptonovo raspršenje	13
2	Schrödingerova jednadžba i primjene	16
2.1	Valna svojstva čestica	16
2.2	Heisenbergove relacije neodređenosti	17
2.3	Schrödingerova jednadžba u jednoj dimenziji	18
2.4	Slobodna čestica	19
2.5	Čestica u jednodimenzionalnoj kutiji (beskonačna pravokutna potencijalna jama)	20
2.6	Čestica u konačnoj pravokutnoj potencijalnoj jami	21
2.7	Pravokutna potencijalna barijera i tuneliranje	22
2.8	Linearni harmonijski oscilator	24
2.9	Schrödingerova jednadžba u 3-D	24
2.10	Čestica u 3-D kutiji	25
2.11	Vodikov atom	26
3	Metali i poluvodiči	29
3.1	Metali	29
3.2	Poluvodiči	33
3.3	Poluvodička dioda	37
3.4	Hallov učinak	38
	Literatura	40

1 Struktura atoma i fotonska priroda elektromagnetskog zračenja

1.1 Molekulski sastav tvari

Mase atoma i molekula se najčešće izražavaju u atomskim jedinicama mase. Atomska jedinica mase (u) definira se kao $1/12$ mase atoma izotopa ugljika ^{12}C , te vrijedi $u = 1,66057 \cdot 10^{-27}$ kg.

Mogu se definirati sljedeće veličine:

Relativna atomska masa A_r :

$$A_r = \frac{m_a}{u} \quad (1.1)$$

gdje je m_a masa atoma.

Relativna molekulska masa M_r :

$$M_r = \frac{m_M}{u} \quad (1.2)$$

gdje je m_M masa molekule.

Zbog postojanja izotopa, atoma istog elementa (istog atomskog broja Z), ali različite mase (različitog masenog broja A), relativna atomska masa pojedinog elementa dobiva se uzimajući u obzir relativne udjele pojedinih izotopa u prirodi. Na primjer, klor posjeduje dva izotopa: ^{35}Cl (zastupljenost u prirodi 75,4 %) i ^{37}Cl (zastupljenost u prirodi 24,6 %). Stoga je relativna atomska masa klora dana s:

$$A_r(\text{Cl}) = 0,754 A_r(^{35}\text{Cl}) + 0,246 A_r(^{37}\text{Cl}) = 35,457 \quad (1.3)$$

Količina tvari se izražava u jedinici mol, pri čemu 1 mol tvari sadrži točno određen broj čestica (atoma, molekula) te tvari. Po definiciji, mol je količina tvari sustava koji sadrži toliko čestica (atoma, molekula, elektrona...) koliko ima atoma u 12 g ugljika ^{12}C . Broj atoma u 12 g ugljika ^{12}C naziva se Avogadrova konstanta: $N_A = 6,02214076 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ [1].

Prema tome, količina (množina) tvari sustava n dana je s:

$$n = \frac{N}{N_A} \quad (1.4)$$

gdje je N broj čestica u uzorku.

Molna masa M se definira kao masa 1 mola neke tvari, odnosno:

$$M = \frac{m}{n} \quad (1.5)$$

gdje je m masa tvari, a n količina tvari.

Vrijedi:

$$m_a = \frac{M}{N_A} \quad (1.6)$$

$$m_M = \frac{M}{N_A} \quad (1.7)$$

Također, molni volumen V_m se definira kao volumen 1 mola neke tvari, odnosno:

$$V_m = \frac{V}{n} \quad (1.8)$$

gdje je V volumen uzorka, a n količina tvari sustava. Iz Avogadrova zakona slijedi da količina tvari 1 mol bilo kojeg plina u istim uvjetima ima jednak volumen koji se naziva molni volumen plina V_m . Pri normiranim uvjetima ($T = 273,15$ K, $p = 101325$ Pa) molni volumen iznosi $V_m = 22,4 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$.

Faradayev zakon elektrolize

Elektroliza je proces vođenja električne struje kroz otopine (tekućine). U tipičnom eksperimentu se u polarnoj tekućini (npr. H_2O) otopi elektrolit (npr. NaCl ili neki dugi ionski kristal), čime nastaje otopina koja sadrži slobodne nosioce naboja – pozitivno nabijene katione (Na^+) i negativno nabijene anione (Cl^-). Ako se u takvu otopinu urone dvije metalne elektrode i priključe se na izvor istosmjernog napona, kroz otopinu će prolaziti električna struja zbog slobodnih kationa i aniona u otopini. Pri ovakvom procesu će se na elektrodi priključenoj na pozitivan pol baterije (anodi) taložiti anioni (negativni ioni), dok će se na elektrodi priključenoj na negativan pol baterije (katodi) taložiti kationi (pozitivni ioni), odnosno nakupljat će se materijal na elektrodama.

Faradayevi empirijski zakoni elektrolize:

1. Količina tvari koja se izluči na elektrodi proporcionalna je količini elektriciteta koji je prošao kroz elektrolit i vremenu:

$$m = kIt \quad (1.9)$$

gdje je m masa izlučena na elektrodi, I struja kroz elektrolit, t vrijeme, a k :

$$k = \frac{M}{wq} \quad (1.10)$$

gdje je M molna masa izražena u g mol^{-1} , w valencija, a $q = 96500 \text{ C mol}^{-1}$.

2. Jednake količine elektriciteta izlučuju različite tvari u omjeru njihovih atomskih masa:

$$m_1 : m_2 \dots = \frac{A_1}{w_1} : \frac{A_2}{w_2} \dots \quad (1.11)$$

gdje je A maseni broj elementa.

1.2 Rutherfordov eksperiment

U Rutherfordovom eksperimentu se razmatra raspršenje pozitivno nabijenih čestica na tankim metalnim folijama. Čestice koje se raspršuju se nazivaju projektili, a atomi metala (na kojima se projektili raspršuju) se nazivaju mete. Rutherford je kao projektele koristio α -čestice (jezgre atoma helija, ${}^4_2\text{He}$), dok su mete bili atomi zlata, srebra ili bakra. Zbog puno veće mase atoma metala u odnosu na masu projektila, može se pretpostaviti da pri međudjelovanju atoma i projektila atom miruje. Također, zbog puno veće mase projektila u odnosu na masu elektrona, može se pretpostaviti da pozitivno nabijeni projektili međudjeluju samo s pozitivno nabijenom jezgrom u atomu (međudjelovanje projektila s elektronima u atomu mete se može zanemariti).

Prema tome, općenito u Rutherfordovom eksperimentu pozitivno nabijeni projektili naboja Z_1e upadaju na centar raspršenja naboja Z_2e (jezgru atoma mete), pri čemu je $Z_1 \ll Z_2$. Zbog elektrostatske odbojne sile između projektila i jezgre atoma mete, projektili skreću sa svoje prvobitne putanje, tj. raspršuju se.

Broj projektila koji se raspršuju unutar određenog kuta može se izračunati prema relaciji:

$$dN = \frac{N_0 n d}{2\pi} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{8\epsilon_0 E} \right)^2 \frac{\sin\theta}{\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)^4} d\theta \quad (1.12)$$

gdje je:

dN - broj projektila koji se raspršuju u prostornom kutu između θ i $\theta + d\theta$

N_0 - broj projektila (po jedinici površine i jedinici vremena) koji upadaju na metu

n - koncentracija atoma mete

d - debljina mete

E - kinetička energija projektila

ϵ_0 - permitivnost vakuumu koja iznosi $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$.

1.3 Bohrov model vodikovog atoma

Spektar vodikovog atoma

Eksperimenti s užarenim plinovima (gdje se međudjelovanje pojedinih atoma može zanemariti) pokazivali su da plinovi zagrijani na određenu temperaturu emitiraju elektromagnetske valove (svjetlost) samo određene valne duljine. Kirchhoff i Bunsen su još sredinom 19 st. zaključili da svaki element u plinovitom stanju posjeduje karakterističan emisijski linijski spektar. Također, ako se plin na sobnoj temperaturi obasja bijelom svjetlošću (svjetlošću koja sadrži sve valne duljine vidljivog dijela spektra), može se primijetiti da će atomi plina apsorbirati samo određene valne duljine. Odnosno, i emisijski i apsorpcijski spektri plinova su diskretni, tj. sastoje se od diskretnih linija određenih valnih duljina. Pritom, emisijski spektar nekog elementa sadrži sve linije iz apsorpcijskog spektra, ali i neke linije kojih nema u apsorpcijskom spektru.

Spektralne linije koje se javljaju u spektru plinovitog vodika mogu se izračunati pomoću empirijske relacije:

$$\bar{\nu} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.13)$$

gdje je $\bar{\nu}$ valni broj, R Rydbergova konstanta $R = 1,097373 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$, a m i n prirodni brojevi, pri čemu je $m < n$. Valni broj se definira pomoću valne duljine promatrane linije λ :

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} \quad (1.14)$$

Mjerna jedinica valnog broja je m^{-1} .

Spektralne linije vodika se mogu grupirati u tzv. serije. Broj m karakterizira pojedinu seriju spektra vodikovog atoma:

$m = 1$ Lymanova serija

$m = 2$ Balmerova serija

$m = 3$ Pashenova serija

$m = 4$ Bracketova serija itd.

Bohrovi postulati

1. Elektron se u atomu kreće po kružnoj putanji oko jezgre pod djelovanjem Coulombove privlačne sile između jezgre i elektrona te se pokorava zakonima klasične mehanike.
2. Za razliku od klasične mehanike, elektron se ne može kretati po proizvoljnoj orbiti oko jezgre, već samo po točno određenim (diskretnim) orbitama na kojima ima točno određene (diskretne) vrijednosti energije (E_n). Dozvoljene orbite po kojima se kreće elektron, određene su iz uvjeta da iznos orbitalnog angularnog momenta elektrona bude

kvantiziran prema relaciji:

$$|\vec{l}| = mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad (1.15)$$

3. Kada se elektron nalazi u pojedinoj orbiti (odnosno kvantnom stanju) on ne zrači elektromagnetske valove, iako se giba po kružnici i ima centripetalno ubrzanje. Do emisije elektromagnetskog zračenja dolazi pri prijelazu elektrona između dviju orbita, pri čemu vrijedi da je energija emitiranog fotona $h\nu$ jednaka razlici energija tih dviju orbita:

$$h\nu = E_n - E_m \quad (1.16)$$

Analogno, atom može apsorbirati elektromagnetsko zračenje samo ako je energija zračenja jednaka razlici energija početnog i završnog stanja.

Prema 1. postulatu, elektrostatska privlačna sila između elektrona i jezgre (tj. protona u slučaju vodikovog atoma) djeluje kao centripetalna sila koja drži elektron na kružnoj putanji oko jezgre:

$$F_e = F_{cp} \quad (1.17)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (1.18)$$

Pomoću relacije (1.18) i 2. postulata (relacije 1.15) mogu se izračunati energija i brzina koju elektron posjeduje u pojedinoj orbiti, kao i polumjer određene elektronske orbite:

- kinetička energija K_n i potencijalna energija U_n elektrona na n -toj orbiti dane su s:

$$K_n = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad (1.19)$$

$$U_n = -\frac{m_e e^4}{4\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad (1.20)$$

gdje je:

m_e - masa elektrona $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg

e - naboj elektrona $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$ C

ϵ_0 - permitivnost vakuuma $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ C² N⁻¹ m⁻²

h - Planckova konstanta $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J s

- energija n -tog stanja:

$$E_n = K_n + U_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = (-13,6 \text{ eV}) \cdot \frac{1}{n^2} \quad (1.21)$$

- polumjer n -te orbite:

$$r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2} n^2 = a_0 n^2 \quad (1.22)$$

gdje je $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10}$ m polumjer orbite osnovnog stanja (Bohrov polumjer)

- brzina elektrona u n -toj orbiti:

$$v_n = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} \frac{1}{n} \quad (1.23)$$

1.4 Ioni slični vodiku

Bohrova teorija se, osim na vodikov atom, može primjeniti i na ione s jednim elektronom u elektronskom omotaču (na primjer He^+ ili Li^{2+}). Vrijedi:

- energija n -tog stanja:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{Z^2}{n^2} = (-13,6 \text{ eV}) \frac{Z^2}{n^2} \quad (1.24)$$

gdje je:

m_e - masa elektrona $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg

e - naboj elektrona $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$ C

ε_0 - permitivnost vakuumu $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ C² N⁻¹ m⁻²

h - Planckova konstanta $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J s

Z - atomski broj elementa (broj protona u jezgri)

- polumjer n -te orbite:

$$r_n = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m_e e^2} \frac{n^2}{Z} = a_0 \frac{n^2}{Z} \quad (1.25)$$

gdje je $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10}$ m polumjer orbite osnovnog stanja (Bohrov polumjer).

Spektralne linije iona sličnih vodiku se mogu izračunati pomoću relacije:

$$\bar{\nu} = RZ^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.26)$$

gdje je $\bar{\nu}$ valni broj, R Rydbergova konstanta, m kvantni broj početnog stanja, a n kvantni broj konačnog stanja.

Koristeći relacije (1.16) i (1.21) može se dobiti Rydbergova empirijska formula (1.13) za valne duljine koje se javljaju u spektru plina vodika.

1.5 Rendgensko zračenje

Rendgenska cijev se sastoji od dviju elektroda (anode i katode), smještene u vakuumsku cijev. Zagrijavanjem katode dolazi do emisije elektrona iz katode te se elektroni ubrzavaju u visokoj razlici potencijala U (najčešće nekoliko desetaka tisuća volta) prema anodi. Prilikom sudara

elektrona visoke energije s anodom, dolazi do emisije rendgenskog zračenja s te elektrode. Spektar rendgenskog zračenja se sastoji od dva dijela:

1. Kontinuirani dio rendgenskog spektra - nastaje jer se elektroni raspršuju na jezgrama atoma u anodi i usporavaju. Prema klasičnoj elektrodinamici, nabijena čestica koja usporava emitira elektromagnetsko zračenje (zakočno zračenje ili *Bremsstrahlung*). Energija emitiranog fotona jednaka je razlici početne i konačne energije elektrona. Budući da elektron može gubiti proizvoljne iznose svoje kinetičke energije, nastaje kontinuiran spektar. Maksimalna energija zračenja nastaje ako sva kinetička energija elektrona prijede u elektromagnetsko zračenje:

$$h\nu_{\max} = eU \quad (1.27)$$

2. Diskretni dio rendgenskog spektra – nastaje jer ubrzani elektroni izbijaju elektrone iz unutrašnjih ljuski atoma anode, te na njihovo mjesto dolaze elektroni iz viših ljuski. Kao posljedica tog procesa emitira se kvant energije (foton) koji odgovara razlici energija pripadnih elektronskih stanja. Prema empirijskom Mosleyevom zakonu linije diskretnog spektra dane su izrazom:

$$\bar{\nu} = R(Z - b)^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.28)$$

gdje je R Rydbergova konstanta, Z atomski broj elementa od kojeg je građena anoda, m glavni kvantni broj početne razine, n glavni kvantni broj konačne razine, a b konstanta koja karakterizira danu liniju (npr. za K_α liniju $b = 1$, za L_α $b = 7,4$).

1.6 Alkalni atomi

Alkalni atomi su jednovalentni atomi, odnosno atomi s jednim valentnim elektronom (na primjer Li, Na, Cs itd.). Zbog odbojnog elektrostatskog međudjelovanja između valentnog elektrona i elektrona na unutarnjim orbitalama, može se razmotriti model prema kojem na valentni elektron ne djeluje cijeli naboj jezgre atoma (Ze), već se energijske razine valentnog elektrona mogu aproksimirati jednoelektronskim atomom, pri čemu na taj elektron djeluje pozitivan naboj $Z_{\text{eff}}e$ (gdje je $Z_{\text{eff}} < Z$). Ovakva pojava se naziva zasjenjenje jezgre, tj. valentnom elektronom pozitivno nabijenu jezgru „zasjenjuju“ elektroni na unutarnjim orbitalama. Iznos Z_{eff} ovisi o orbitali na kojoj se nalazi valentni elektron, tj. $Z_{\text{eff}} = Z_{\text{eff}}(n, l)$. Energijske razine valentnog elektrona alkalnog atoma mogu se aproksimirati izrazom:

$$E(n, l) = -\frac{Rhc}{[n - \Delta(n, l)]^2} \quad (1.29)$$

gdje je R Rydbergova konstanta za dani element, h Planckova konstanta, c brzina svjetlosti, n glavni kvantni broj stanja, a $\Delta(n, l)$ kvantni defekt koji osim o n ovisi i o orbitalnom kvantnom broju l . Za prijelaz elektrona s jedne energijske razine na drugu mora biti zadovoljen uvjet $\Delta l = \pm 1$.

1.7 Struktura atoma

Stanje elektrona u atomu karakterizirano je s četiri kvantna broja:

- Glavni kvantni broj n – određuje ljusku u kojoj se nalazi elektron. Ljuske koje pripadaju kvantnim brojevima $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ označavaju se redom slovima K, L, M, N, ...
- Orbitalni kvantni broj l – određuje podljusku u kojoj se nalazi elektron. Za dani glavni kvantni broj n , l može poprimiti vrijednosti $0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$. Podljuske koje pripadaju kvantnim brojevima $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ označavaju se redom slovima s, p, d, f, \dots
- Magnetski orbitalni kvantni broj m_l – za dani orbitalni kvantni broj l , m_l može poprimiti vrijednosti $-l, -l + 1, -l + 2, \dots, l - 2, l - 1, l$.
- Magnetski spinski kvantni broj m_s može poprimiti vrijednosti $\pm \frac{1}{2}$.

Općenito, u višeelektronskim atomima, energija elektrona ovisi o kvantnim brojevima n i l , odnosno o ljusci i podljusci u kojoj se nalazi elektron. Pri prijelazu elektrona iz jednog kvantnog stanja u drugo moraju biti zadovoljeni uvjeti $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m_l = 0, \pm 1$. Bez prisustva vanjskog magnetskog polja kvantni brojevi m_l i m_s ne utječu na energiju elektrona.

Elektron u atomu posjeduje dva angularna momenta:

1. Orbitalni angularni moment \vec{l} - posljedica orbitalnog gibanja elektrona u području oko jezgre atoma:

$$|\vec{l}| = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad (1.30)$$

gdje je \hbar reducirana Planckova konstanta ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$). Projekcija orbitalnog angularnog momenta na os z može poprimiti vrijednosti $l_z = \hbar m_l$.

2. Spinski angularni moment \vec{s} - vlastiti (intrinzični) angularni moment elektrona:

$$|\vec{s}| = \hbar \sqrt{s(s+1)} \quad (1.31)$$

Elektron je čestica spina $s = \frac{1}{2}$ pa spinski angularni moment elektrona ima vrijednost $\hbar \sqrt{\frac{3}{4}}$. Projekcija spinskog angularnog momenta na os z može poprimiti vrijednosti $s_z = \hbar m_s = \pm \frac{1}{2} \hbar$.

Ukupni angularni moment \vec{j} definira se kao $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ te ima vrijednost:

$$|\vec{j}| = \hbar\sqrt{j(j+1)} \quad (1.32)$$

pri čemu kvantni broj j može poprimiti vrijednosti $j = |l - s|, |l - s| + 1, \dots, l + s$. Projekcija ukupnog angularnog momenta \vec{j} na os z ima vrijednosti $j_z = \hbar m_j$ pri čemu m_j poprima vrijednosti $m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$ za dani j . S elektronom se povezuju magnetski dipolni momenti:

– magnetski orbitalni dipolni moment:

$$\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m}\vec{l} \quad (1.33)$$

te vrijedi:

$$|\vec{\mu}_l| = \frac{e}{2m}\hbar\sqrt{l(l+1)} \quad (1.34)$$

$$|\vec{\mu}_l| = \mu_B\sqrt{l(l+1)} \quad (1.35)$$

gdje je μ_B Bohrov magneton:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (1.36)$$

i iznosi $\mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J T}^{-1} = 5,788 \cdot 10^{-5} \text{ eV T}^{-1}$

– magnetski spinski dipolni moment:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m}\vec{s} \quad (1.37)$$

te vrijedi:

$$|\vec{\mu}_s| = 2\mu_B\sqrt{s(s+1)} \quad (1.38)$$

– ukupni magnetski dipolni moment $\vec{\mu}_j$:

$$|\vec{\mu}_j| = \mu_B g \sqrt{j(j+1)} \quad (1.39)$$

gdje je g Landeov faktor definiran kao:

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (1.40)$$

1.8 Višeelektronski sustavi

Razmatra se višeelektronski atom (atom s n elektrona). Definira se:

- L – ukupni orbitalni kvantni broj atoma (stanja koja pripadaju kvantnim brojevima $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ označavaju se velikim slovima S, P, D, F,...)
- S – ukupni spin atoma.

Ukupni orbitalni angularni moment atoma:

$$|\vec{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)} \quad (1.41)$$

Ukupni spinski angularni moment atoma:

$$|\vec{S}| = \hbar\sqrt{S(S+1)} \quad (1.42)$$

Ukupni angularni moment atoma:

$$|\vec{J}| = \hbar\sqrt{J(J+1)} \quad (1.43)$$

gdje u slučaju LS interakcije vrijedi $J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S$. Projekcija ukupnog angularnog momenta \vec{J} na os z ima vrijednosti $J_z = \hbar M_j$ pri čemu M_j poprima vrijednosti $M_j = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$ za dani J . Kvantno stanje atoma označava se kao $^{2S+1}L_J$.
Magnetski dipolni momenti atoma:

- magnetski orbitalni dipolni moment:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m}\vec{L} \quad (1.44)$$

te vrijedi:

$$|\vec{\mu}_L| = \frac{e}{2m}\hbar\sqrt{L(L+1)} \quad (1.45)$$

$$|\vec{\mu}_L| = \mu_B\sqrt{L(L+1)} \quad (1.46)$$

gdje je μ_B Bohrov magneton:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (1.47)$$

i iznosi $\mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J T}^{-1} = 5,788 \cdot 10^{-5} \text{ eV T}^{-1}$

- magnetski spinski dipolni moment:

$$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{m}\vec{S} \quad (1.48)$$

te vrijedi:

$$|\vec{\mu}_S| = 2\mu_B\sqrt{S(S+1)} \quad (1.49)$$

– ukupni magnetski dipolni moment $\vec{\mu}_J$:

$$|\vec{\mu}_J| = \mu_B g \sqrt{J(J+1)} \quad (1.50)$$

gdje je g Landeov faktor definiran kao:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (1.51)$$

Projekcija ukupnog magnetskog momenta na os z dana je s $(\mu_j)_z = g\mu_B M_J$.

1.9 Zeemanov efekt

Zeemanov efekt je pojava cijepanja energijskih razina atoma (a time i spektralnih linija atoma) u vanjskom magnetskom polju \vec{B} . Do njega dolazi jer elektron posjeduje magnetski moment $\vec{\mu}$ koji interagira s vanjskim magnetskim poljem. Općenito, u vanjskom magnetskom polju će na česticu koja posjeduje magnetski moment djelovati moment sile $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$, koji nastoji zakrenuti smjer dipolnog momenta u pravcu vanjskog polja. Također, svaka čestica koja posjeduje magnetski dipolni moment $\vec{\mu}$ u vanjskom magnetskom polju \vec{B} dobiva dodatnu energiju $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

Normalni Zeemanov efekt – promatra se međudjelovanje magnetskog polja samo s orbitalnim magnetskim momentom atoma (spin se zanemaruje). Ako uzmemo da je vanjsko magnetsko polje usmjereno duž osi z tada će se kod jednoelektronskih sistema (atoma s jednim elektronom i alkalnih atoma) energija elektrona promijeniti za iznos:

$$U = \mu_B m_l B \quad (1.52)$$

gdje je μ_B Bohrov magneton, B magnetsko polje, a m_l magnetski orbitalni kvantni broj elektrona. Kod anomalnog Zeemanovog efekta razmatra se ukupni magnetski dipolni moment elektrona (orbitalni i spinski magnetski dipolni moment) te je cijepanje energijske linije elektrona u magnetskom polju \vec{B} tada dano s:

$$U = g\mu_B m_j B \quad (1.53)$$

gdje je g Landeov faktor, μ_B Bohrov magneton, B magnetsko polje, a m_j poprima vrijednost $m_j = j, -j+1, \dots, j-1, j$ za dani j . U vanjskom magnetskom polju \vec{B} , totalni angularni moment \vec{J} precesira oko smjera magnetskog polja kružnom frekvencijom:

$$\omega = \frac{g\mu_B B}{\hbar} \quad (1.54)$$

Pri prijelazima atoma iz jednog stanja u drugo trebaju biti zadovoljena sljedeća pravila za promjenu kvantnih brojeva: $\Delta J = 0, \pm 1$ (osim za prijelaze $J = 0$ u $J = 0$), $\Delta M_j = 0, \pm 1$, $\Delta S = 0$, $\Delta L = 0, \pm 1$. Za jednoelektronske sisteme prijelazna pravila su: $\Delta j = 0, \pm 1$ (osim za prijelaze $j = 0$ u $j = 0$), $\Delta m_j = 0, \pm 1$, $\Delta l = \pm 1$.

1.10 Fotoelektrični učinak

Fotoelektrični učinak (fotoelektrični efekt) je pojava emisije elektrona iz metala pod djelovanjem elektromagnetskog (EM) zračenja. Najjednostavniji oblik eksperimenta povezan s fotoelektričnim učinkom može se izvesti u fotocijevi, vakuumskoj cijevi koja se sastoji od dviju elektroda – katode i anode. Kada se katoda izloži EM zračenju određene frekvencije, EM zračenje uzrokuje emisiju elektrona s katode. Ako se na katodu i anodu priključi razlika potencijala U_{AC} elektroni bivaju privučeni pozitivnijim potencijalom na anodi i strujnim krugom prolazi struja.

Eksperimentalni rezultati su pokazali sljedeće:

- Do fotoemisije elektrona s katode dolazi samo ako je frekvencija EM zračenja ν veća od neke granične vrijednosti ν_g . Pritom, granična frekvencija ovisi o metalu od kojeg je načinjena katoda. Za većinu metala ν_g je u ultraljubičastom području.
- Neki elektroni se s katode emitiraju s velikim početnim brzinama (kinetičkim energijama). Naime, ako se anoda priključi na niži potencijal u odnosu na katodu, opaža se smanjenje fotostruje, a za $U_{AC} = -U_z$ struja fotoelektrona se smanjuje na nulu gdje je U_z zaustavni napon. Prema tome, za $U_{AC} = -U_z$ zaustavljaju se fotoelektroni s najvećom kinetičkom energijom K_{maks} , odnosno vrijedi $eU_z = K_{maks}$.
- Zaustavni napon U_z ne ovisi o intenzitetu svjetlosti, dok vrijednost zaustavnog napona (a time i najveća kinetička energija fotoelektrona) raste linearno s povećanjem frekvencije EM zračenja.

Navedeni eksperimentalni rezultati se nisu mogli objasniti s valnom teorijom EM zračenja, već je za objašnjenje fotoelektričnog učinka bio potreban novi model kojim će se opisati prijenos energije između EM zračenja i materije. Albert Einstein je 1905. godine dao objašnjenje fotoelektričnog učinka na temelju pretpostavke da je energija EM zračenja koncentrirana u lokaliziranim paketima (kvantima). Pri tome je energija kvanta EM zračenja (fotona) jednaka $h\nu$ gdje je h Planckova konstanta, a ν frekvencija EM zračenja.

Prema Einsteinu, fotoelektrični učinak je međudjelovanje elektrona s jednim fotonom:

- ako je $h\nu > W_i$ – foton se apsorbira od strane elektrona (elektron se emitira s površine metala)

- ako je $h\nu < W_i$ – foton se neće apsorbirati od strane elektrona (elektron se ne emitira s površine metala)

gdje je W_i izlazni rad za dani metal, odnosno energija koju treba predati metalu na apsolutnoj nuli da bi slobodni elektroni najveće energije mogli svladati privlačne sile koje ih vezuju za metal i emitirati se s njegove površine.

Najmanja energija potrebna da se emitira elektron je za $\nu = \nu_g$, te vrijedi $h\nu_g = W_i$. Za $\nu > \nu_g$ energija fotona se utroši na izlazni rad i kinetičku energiju fotoelektrona:

$$E_f = W_i + K_{\text{maks}} \quad (1.55)$$

gdje je E_f energija fotona frekvencije ν (valne duljine λ):

$$E_f = h\nu \quad (1.56)$$

$$E_f = h\frac{c}{\lambda} \quad (1.57)$$

a najveća kinetička energija koju mogu dobiti elektroni pri fotoelektričnom učinku K_{maks} može se zapisati kao:

$$K_{\text{maks}} = \frac{mv_{\text{maks}}^2}{2} \quad (1.58)$$

Vrijednost K_{maks} se ekperimentalno određuje mjereći zaustavni napon U_z što je je najmanja vrijednost napona koju treba priključiti u odnosu na metal da bi se u potpunosti zaustavili fotoelektroni te vrijedi:

$$eU_z = K_{\text{maks}} \quad (1.59)$$

1.11 Comptonovo raspršenje

Comptonovo raspršenje (Comptonov efekt) je pojava raspršenja elektromagnetskog zračenja malih valnih duljina (rendgenskog zračenja ili gama-zračenja) na slabo vezanim elektronima u materijalu (slika 1). Eksperimenti Arthura Comptona su 1922. godine pokazali da ako rendgensko zračenje valne duljine λ upada na materijal, dio raspršenog zračenja ima veću valnu duljinu od upadnog zračenja odnosno $\lambda' > \lambda$. Pri tome, valna duljina raspršenog zračenja λ' ovisi o kutu raspršenja θ .

Comptonovi eksperimentalni rezultati se nisu mogli objasniti valnom prirodom EM zračenja, već korištenjem fotonskog modela. Prema fotonskom modelu EM zračenja, ova pojava se razmatra kao sudar dviju čestica (elektrona i fotona) te se koriste zakoni očuvanja energije i impulsa (prije i poslije sudara):

- zakon očuvanja energije:

$$E_f + E_e = E_f' + E_e' \quad (1.60)$$

gdje je:

E_f - energija fotona prije sudara ($E_f = \frac{hc}{\lambda}$)

E_e - energija elektrona prije sudara (ako se pretpostavi da elektron prije sudara miruje, odnosno ima mnogo manju brzinu od fotona, vrijedi $E_e = mc^2$)

E'_f - energija fotona nakon sudara ($E'_f = \frac{hc}{\lambda'}$)

E'_e - energija elektrona nakon sudara

– zakon očuvanja količine gibanja:

$$\vec{p}_f + \vec{p}_e = \vec{p}'_f + \vec{p}'_e \quad (1.61)$$

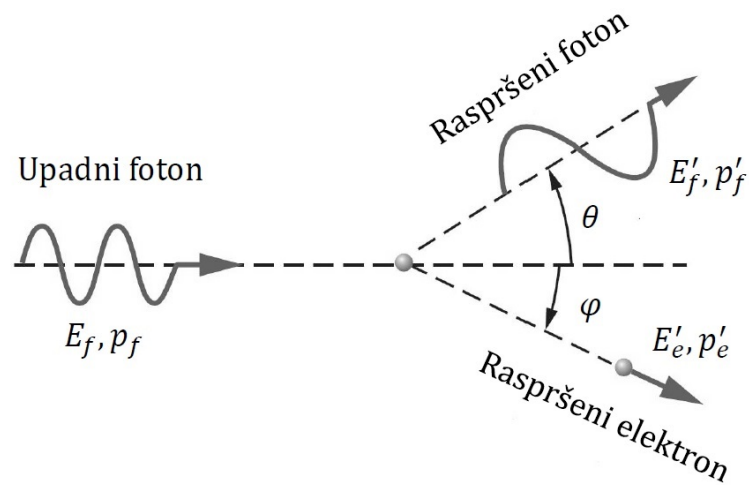
gdje je:

\vec{p}_f - količina gibanja fotona prije sudara

\vec{p}_e - količina gibanja elektrona prije sudara (ako se pretpostavi da elektron prije sudara miruje, odnosno ima mnogo manju brzinu od fotona, vrijedi $p_e = 0$)

\vec{p}'_f - količina gibanja fotona nakon sudara

\vec{p}'_e - količina gibanja elektrona nakon sudara



Slika 1: Comptonovo raspršenje [4]

Pri razmatranju Comptonovog raspršenja trebaju se koristiti relativistički izrazi za impuls i energiju elektrona. Energija elektrona je dana s relacijom:

$$E_e = mc^2 + K \quad (1.62)$$

dok je veza između energije i količine gibanja:

$$E_e^2 = (mc^2)^2 + (p_e c)^2 \quad (1.63)$$

gdje je K kinetička energija elektrona, m masa mirovanja elektrona, a p_e količina gibanja. Količina gibanja fotona je dana s:

$$p_f = \frac{h}{\lambda} \quad (1.64)$$

dok je veza između energije i količine gibanja fotona:

$$E_f = p_f c \quad (1.65)$$

Iz gornjih izraza se može izvesti relacija za promjenu valne duljine EM zračenja pri Comptonovom raspršenju:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) \quad (1.66)$$

gdje je λ valna duljina svjetlosti prije raspršenja, λ' valna duljina svjetlosti nakon raspršenja, m masa elektrona, a θ kut raspršenja fotona. Također, kut pod kojim se elektron rasprši nakon međudjelovanja s fotonom (u odnosu na upadni foton) može se izračunati iz relacije:

$$\tan \varphi = \frac{\lambda\lambda' \sin \theta}{\lambda - \lambda' \cos \theta} \quad (1.67)$$

2 Schrödingerova jednadžba i primjene

2.1 Valna svojstva čestica

Prema de Broglievom postulatima svakoj čestici impulsa (količine gibanja) p pridružena je valna duljina λ prema relaciji:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (2.1)$$

gdje je h Planckova konstanta.

U nerelativističkoj aproksimaciji ($K \ll E_0$, K – kinetička energija čestice, $E_0 = mc^2$ – energija mirovanja) vrijedi:

$$p = mv \quad (2.2)$$

$$K = \frac{p^2}{2m} \quad (2.3)$$

gdje je v brzina čestice. Ako uvjet $K \ll E_0$ nije zadovoljen trebaju se koristiti relativističke jednadžbe za energiju:

$$E = K + mc^2 \quad (2.4)$$

$$E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2 \quad (2.5)$$

i količinu gibanja:

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (2.6)$$

Čestica se u kvantnoj fizici opisuje valnom funkcijom. Za razliku od ravnog vala koji je potpuno delokaliziran te ima dobro definiranu valnu duljinu λ (odnosno valni broj k), čestica se zamišlja u obliku valnog paketa – superpozicije (zbroya) velikog broja ravnih valova, koji se širi prostorom i koji je lokaliziran u jednom dijelu prostora. Valni paket sadrži velik broj valnih brojeva te općenito kružna frekvencija pokazuje funkcijsku ovisnost o valnom broju, tj. vrijedi $\omega = \omega(k)$, a valni brojevi ravnih valova se kontinuirano mijenjaju duž nekog intervala.

Razmatra se obitelj sinusoidalnih valova (istih amplituda) s kontinuiranim raspodjelama valnih brojeva k oko vrijednosti k_0 (zbog jednostavnosti se zanemari vremenska ovisnost u valnoj jednadžbi):

$$y_k(x) = A \cos(kx) \quad k_0 - \frac{\Delta k}{2} \leq k \leq k_0 + \frac{\Delta k}{2} \quad (2.7)$$

Potraži se superpozicija takvih valova:

$$y(x) = \int y_k(x) dk \quad (2.8)$$

Vrijedi:

$$y(x) = \frac{2A}{x} \sin(\Delta kx) \cos(k_0x) \quad (2.9)$$

Ovakav valni oblik se zove valni paket. Član $\frac{2A}{x} \sin(\Delta kx)$ opisuje envelopu valnog paketa, dok faktor $\cos(k_0x)$ opisuje prostorne oscilacije unutar envelope. Valni paket je entitet koji posjeduje i čestična i valna svojstva odnosno lokaliziran je u dijelu prostora (svojstvo čestice) i pokazuje periodične oscilacije u dijelovima prostora (valno svojstvo).

Razlikuju se grupna i fazna brzina valnog paketa (brzina oscilacija unutar valnog paketa može biti različita od brzine kojom valni paket putuje kroz prostor). Grupna brzina v_g je brzina kojom se valni paket širi prostorom:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (2.10)$$

gdje je ω kružna frekvencija, a k valni broj definiran kao:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.11)$$

Fazna brzina v_ϕ je brzina kojom se širi mjesto iste faze:

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} \quad (2.12)$$

2.2 Heisenbergove relacije neodređenosti

U kvantnoj mehanici se ne mogu istovremeno mjeriti određene fizičke veličine npr. impuls i položaj (koordinata) čestice ili energija i vrijeme. Što se bolje poznaje impuls čestice, ima se manje informacija o njenom položaju i obratno. To je posljedica Heisenbergovih relacija neodređenosti:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \quad (2.13)$$

gdje je Δx neodređenost koordinate čestice, a Δp neodređenost impulsa čestice. Stroga definicija neodređenosti neke fizičke veličine y je:

$$\Delta y = \sqrt{y^2 - \bar{y}^2} \quad (2.14)$$

gdje je \bar{y} prosječna vrijednost fizičke veličine y , a $\overline{y^2}$ prosječna vrijednost od y^2 .

Također vrijedi:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \quad (2.15)$$

gdje je ΔE neodređenost energije čestice, a Δt neodređenost vremena.

2.3 Schrödingerova jednađba u jednoj dimenziji

U kvantnoj mehanici čestica (sistem) se opisuje pomoću valne funkcije. Valna funkcija se dobiva rješavanjem Schrödingerova jednađbe za dani problem. Schrödingerova jednađba je postulat (ona se ne izvodi) i njeno značenje u kvantnoj mehanici je slično drugom Newtonovom postulatu u klasičnoj fizici. Prema tome, temeljna jednađba nerelativističke kvantne mehanike je Schrödingerova jednađba:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (2.16)$$

To je parcijalna diferencijalna jednađba drugog reda pri čemu je $U(x, t)$ potencijalna energija u kojoj se kreće čestica, a $\Psi(x, t)$ valna funkcija čestice.

Za danu potencijalnu energiju $U(x, t)$ rješavanjem Schrödingerove jednađbe dobiva se valna funkcija čestice $\Psi(x, t)$. Valna funkcija čestice sadrži sve informacije koje se mogu saznati o čestici. Ako potencijalna energija ne ovisi o vremenu $U = U(x)$, može se pokazati da će energija čestice (sistema) biti očuvana u vremenu ($E = \text{konst.}$). Ovakva stanja sistema (čestice) se nazivaju stacionarnim stanjima, budući da je energija sistema očuvana u vremenu. U tom slučaju rješenje Schrödingerove jednađbe je dano s:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i\omega t} \quad (2.17)$$

gdje je funkcija ψ rješenje stacionarne (vremenski neovisne) Schrödingerove jednađbe:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.18)$$

a E je ukupna energija čestice (iz de Broglievog postulata $E = \hbar\omega$). Funkcija $\psi(x)$ se naziva i prostorni dio valne funkcije. Za većinu jednostavnih problema u kvantnoj mehanici potencijalna energija ne ovisi o vremenu i problem se svodi na rješavanje stacionarne Schrödingerove jednađbe. Rješavanjem jednađbe (2.18) dobivaju se vrijednosti valnih funkcija i energija čestice (sistema).

Ne može se odrediti točan položaj čestice već samo vjerojatnost da se čestica nalazi u nekom dijelu prostora. Gustoća vjerojatnosti dana je s:

$$\rho(x, t) = \Psi(x, t) \Psi^*(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 \quad (2.19)$$

pri čemu je $\Psi^*(x, t)$ konjugirano kompleksna vrijednost funkcije $\Psi(x, t)$.

Vjerojatnost nalaženja čestice u dijelu prostora omeđenog koordinatama x_1 i x_2 jednaka je:

$$w = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx \quad (2.20)$$

U slučaju da potencijalna energija ne ovisi o vremenu, dovoljno je razmatrati samo prostorni dio valne funkcije, budući da vrijedi:

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad (2.21)$$

Vjerojatnost nalaženja čestice u dijelu prostora omeđenog koordinatama x_1 i x_2 tada je jednaka:

$$w = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx \quad (2.22)$$

Budući da će se u sklopu kolegija Moderna fizika I proučavati samo slučajevi kada potencijalna energija ne ovisi o vremenu, nadalje će se razmatrati samo stacionarna Schrödingerova jednadžba i prostorni dio valne funkcije $\psi(x)$, koji će se, zbog jednostavnosti, zvati valna funkcija čestice (budući da je vremenski dio predstavljen samo fazom valne funkcije $e^{-i\omega t}$ i ne utječe na vjerojatnost nalaženja čestice u prostoru).

Svojstva valne funkcije $\psi(x)$:

a) Uvjet normalizacije valne funkcije:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (2.23)$$

b) U Schrödingerovoj jednadžbi se pojavljuje druga derivacija valne funkcije $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ – da bi funkcija $\psi(x)$ imala drugu derivaciju $\psi(x)$ i $\frac{d\psi(x)}{dx}$ trebaju biti neprekidne funkcije.

c) Valna funkcija reprezentira vjerojatnost nalaženja čestice u prostoru – rješenja Schrödingerove jednadžbe koja teže u beskonačnost u nekom dijelu prostora odbacuju se kao nefizi-kalna.

d) Vjerojatnost nalaženja čestice u dijelu prostora $a < x < b$: $\int_a^b |\psi(x)|^2 dx$.

e) Prosječna (očekivana) vrijednost fizičke veličine $f(x)$ za česticu u stanju opisanom valnom funkcijom $\psi(x)$:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 f(x) dx \quad (2.24)$$

2.4 Slobodna čestica

Slobodnom česticom se naziva čestica koja se giba u konstantnom potencijalu, $U(x) = \text{konst.}$ Tada se može staviti $U(x) = 0$ (jer se nulta razina potencijalne energije može proizvoljno birati). Stacionarna Schrödingerova jednadžba za ovakav problem je dana s:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) \quad (2.25)$$

Rješenje Schrödingerove jednađbe za česticu s energijom E je tada dano s:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (2.26)$$

gdje su A i B brojčane konstante (amplitude ravnog vala), a parametar k :

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (2.27)$$

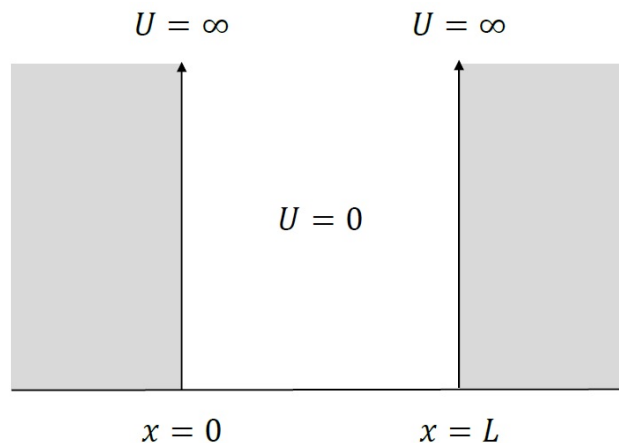
Prvi dio predstavlja ravni val koji se širi u pozitivnom smjeru osi x , a drugi dio je ravni val koji se širi u negativnom smjeru osi x . Energija E čestice i valni vektor k mogu poprimiti proizvoljne vrijednosti (nisu kvantizirani).

2.5 Čestica u jednodimenzionalnoj kutiji (beskonačna pravokutna potencijalna jama)

Pretpostavlja se da je čestica zatočena u dijelu prostora $0 \leq x \leq L$ i da ne može izaći iz njega (slika 2). Ovakav jednostavni model se može primijeniti npr. na slučaj elektrona koji se giba duž konačne nanožice (gibanje je ograničeno na jednu dimenziju).

Potencijalna energija za ovakav problem dana je s:

$$\begin{aligned} U(x) &= 0 \quad \text{za} \quad 0 < x < L \\ U(x) &= \infty \quad \text{za} \quad x = 0 \text{ i } x = L \end{aligned} \quad (2.28)$$



Slika 2: Beskonačna pravokutna potencijalna jama

Problem se svodi na rješavanje vremenski neovisne Schrödingerove jednađbe uz rubne uvjete:

$$\psi(x) = 0 \quad \text{za} \quad x = 0 \text{ i } x = L \quad (2.29)$$

Koristi se uvjet na neprekidnost valne funkcije: izvan kutije je $\psi(x) = 0$ (čestica ne može izaći iz kutije), pa istu vrijednost valna funkcija treba imati i u rubnim točkama $x = 0$ i $x = L$. Rješenja stacionarne Schrödingerove jednađbe (odnosno valne funkcije i energije čestice) uz dane rubne uvjete su:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (2.30)$$

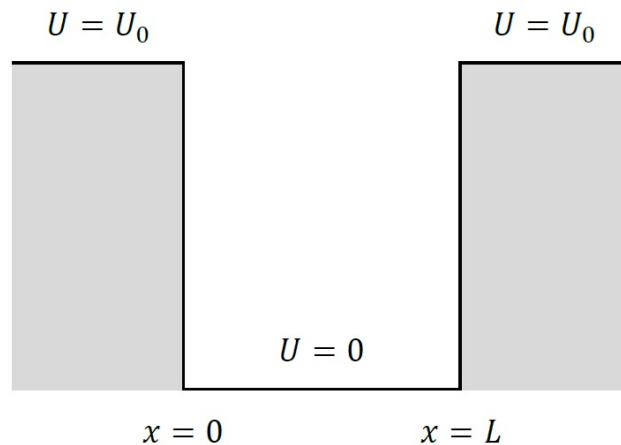
$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2 \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (2.31)$$

Vidi se da je energijski spektar kvantiziran, tj. čestica može poprimiti samo određene (diskretne) vrijednosti energije.

2.6 Čestica u konačnoj pravokutnoj potencijalnoj jami

U ovom se slučaju razmatra gibanje čestice u potencijalu oblika (potencijalnoj jami sa zidovima konačne visine):

$$\begin{aligned} U(x) &= U_0 \quad \text{za } x < 0 \quad \text{i} \quad x > L \\ U(x) &= 0 \quad \text{za } 0 \leq x \leq L \end{aligned} \quad (2.32)$$



Slika 3: Konačna pravokutna potencijalna jama

Rješavanje Schrödingerove jednađbe se razlikuju ovisno vrijedi li za energiju čestice da je $E < U_0$ (vezana stanja – čestica je vezana za područje oko potencijalne jame) ili $E > U_0$ (nevezana stanja – čestica se ponaša kao slobodna čestica). Rješenje stacionarne Schrödingerove

jednađbe za vezana stanja ($E < U_0$) je dano s:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \sin kx + B \cos kx \quad \text{za } 0 \leq x \leq L \quad \text{gdje je } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \psi(x) &= C e^{\chi x} \quad \text{za } x < 0 \quad \text{gdje je } \chi = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \\ \psi(x) &= D e^{-\chi x} \quad \text{za } x > L \end{aligned} \quad (2.33)$$

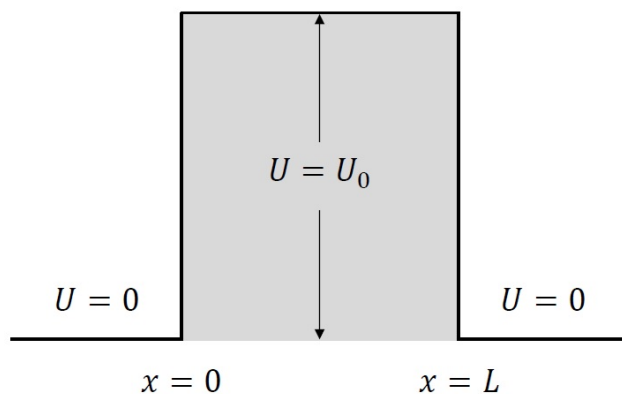
Napomena: Energija čestice E je kvantizirana (poprima samo određene, diskretne vrijednosti), ali se ne može izraziti analički kao u slučaju beskonačne jame. Konstante A , B , C i D se određuju iz uvjeta neprekidnosti valne funkcije i njezine prve derivacije u točkama $x = 0$ i $x = L$. Kao i u slučaju beskonačne potencijalne jame, unutar jame je valna funkcija sinusoidalnog oblika, međutim valna funkcija sada ne iščezava u točkama $x = 0$ i $x = L$, već eksponencijalno opada u područjima izvan potencijalne jame.

2.7 Pravokutna potencijalna barijera i tuneliranje

Potencijalna barijera predstavlja fizički problem u kojem potencijalna energija sistema ima najveću vrijednost. Najjednostavniji slučaj potencijalne barijere je pravokutna potencijalna barijera, koju se može predstaviti potencijalnom energijom oblika:

$$\begin{aligned} U(x) &= U_0 \quad \text{za } 0 \leq x \leq L \\ U(x) &= 0 \quad \text{za } x < 0 \quad \text{i } x > L \end{aligned} \quad (2.34)$$

Ovdje vrijednost U_0 predstavlja visinu potencijalne barijere, a L širinu potencijalne barijere.



Slika 4: Pravokutna potencijalna barijera

Razmatra se čestica s energijom $E < U_0$ koja je u početnom trenutku u području $x < 0$

(lijevo od barijere). Rješenje stacionarne Schrödingerove jednađbe je dano s:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{za } x < 0 \quad \text{gdje je } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \psi(x) &= Ce^{\chi x} + De^{-\chi x} \quad \text{za } 0 \leq x \leq L \quad \text{gdje je } \chi = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \\ \psi(x) &= Fe^{ikx} \quad \text{za } x > L\end{aligned}\tag{2.35}$$

Član Ae^{ikx} predstavlja upadni ravni val (čestica upada na barijeru iz područja $x < 0$), dok je Be^{-ikx} reflektirani val (postoji vjerojatnost refleksije čestice na barijeri). S druge strane, član Fe^{ikx} je transmitirani val (slučaj kada čestica prođe barijeru). Za $0 < x < L$ valna funkcija je opadajuća eksponencijalna funkcija. Konstante B , C , D i F se određuju iz uvjeta neprekidnosti valne funkcije i njezine prve derivacije u točkama $x = 0$ i $x = L$ (konstanta A je amplituda upadnog vala i ona se uzima kao zadana veličina za ovaj problem).

U slučaju pravokutne potencijalne barijere, dvije su značajne razlike između kvantnomehaničkog i klasičnog opisa problema:

- valna funkcija nije jednaka nuli unutar potencijalne barijere (zabranjeno područje prema klasičnoj fizici!)
- čestica koja se u početnom trenutku nalazila u području $x < 0$ ima određenu vjerojatnost da se nađe u području $x > L$.

Pojava da čestica može „prijeći” potencijalnu barijeru iako ima energiju nižu od visine barijere se naziva tuneliranje. Vjerojatnost tuneliranja je dana s:

$$T = \frac{|\text{amplituda transmitiranog vala}|^2}{|\text{amplituda upadnog vala}|^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2}\tag{2.36}$$

Vrijedi:

$$T = Ge^{-2\chi L}\tag{2.37}$$

gdje je:

$$G = \frac{16E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right)\tag{2.38}$$

$$\chi = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}\tag{2.39}$$

2.8 Linearni harmonijski oscilator

Po definiciji linearni harmonijski oscilator je čestica (sistem) koji se giba u polju potencijalne energije oblika $U(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ gdje je m masa čestice, a ω kružna frekvencija. Rješenja stacionarne Schrödingerove jednadžbe za potencijalnu energiju ovakvog oblika su funkcije:

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots \quad (2.40)$$

gdje su A_n normalizacijske konstante, a funkcije $H_n(x)$ se zovu Hermiteovi polinomi. Energija linearnog harmonijskog oscilatora dana je s:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (2.41)$$

U slučaju linearnog harmonijskog oscilatora, kvantni broj n u potpunosti određuje kvantno stanje čestice, tj. valnu funkciju i energiju čestice. Prvih nekoliko Hermiteovih polinoma:

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12y \end{aligned} \quad (2.42)$$

pri čemu je $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$.

2.9 Schrödingerova jednadžba u 3-D

Stacionarna Schrödingerova jednadžba u 3-D ima oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} \right) + U(x, y, z)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (2.43)$$

Svojstva Schrödingerove jednadžbe te valne funkcije su ista kao i kod 1-D slučaja, samo što su sada valna funkcija i potencijalna energija čestice funkcije tri prostorne koordinate x , y i z . Vjerojatnost nalaženja čestice u dijelu prostora volumena V je sada dana s:

$$w = \int_V |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz \quad (2.44)$$

Uvjet normalizacije valne funkcije je sada:

$$\int_V |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1 \quad (2.45)$$

gdje volumen V obuhvaća cijeli prostor.

2.10 Čestica u 3-D kutiji

Pretpostavlja se da je gibanje čestice ograničeno u dijelu prostora $0 < x < L$, $0 < y < L$, $0 < z < L$ (čestica je zarobljena u dijelu prostora oblika kocke i ne može izaći iz njega).

Potencijalna energija za ovakav slučaj može se predstaviti s:

$$\begin{aligned} U(x, y, z) &= 0 \quad \text{za} \quad 0 < x < L, 0 < y < L, 0 < z < L \\ U(x, y, z) &= \infty \quad \text{za} \quad x = 0, L; y = 0, L; z = 0, L \end{aligned} \quad (2.46)$$

Rješava se Schrödingerova jednadžba u 3-D u dijelu prostora $0 < x < L$, $0 < y < L$, $0 < z < L$ (izvan je valna funkcija jednaka nuli):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} \right) = E\psi(x, y, z) \quad (2.47)$$

Rubni uvjeti za ovakav problem su dani s:

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= 0 \quad \text{za} \quad x = 0 \quad \text{i} \quad x = L \\ \psi(x, y, z) &= 0 \quad \text{za} \quad y = 0 \quad \text{i} \quad y = L \\ \psi(x, y, z) &= 0 \quad \text{za} \quad z = 0 \quad \text{i} \quad z = L \end{aligned} \quad (2.48)$$

Gornja jednadžba se može riješiti separacijom varijabli, odnosno valna funkcija se napiše kao umnožak triju funkcija, pri čemu svaka od tih funkcija ovisi samo o jednoj varijabli:

$$\Psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (2.49)$$

gdje svaka pojedinačna funkcija zadovoljava rubne uvjete:

$$\begin{aligned} X(x) &= 0 \quad \text{za} \quad x = 0 \quad \text{i} \quad x = L \\ Y(y) &= 0 \quad \text{za} \quad y = 0 \quad \text{i} \quad y = L \\ Z(z) &= 0 \quad \text{za} \quad z = 0 \quad \text{i} \quad z = L \end{aligned} \quad (2.50)$$

Valne funkcije čestice su dane s:

$$\Psi(x, y, z) = C \sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{n_z\pi}{L}z\right) \quad (2.51)$$

konstanta C se može izračunati iz uvjeta normalizacije valne funkcije, dok su energije čestice:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (2.52)$$

Kvantno stanje čestice (valna funkcija čestice i njezina energija) su u potpunosti opisani s tri kvantna broja n_x, n_y, n_z .

2.11 Vodikov atom

Valna funkcija vodikovog atoma dobije se rješavanjem stacionarne 3-D Schrödingerove jednađbe za potencijalnu energiju oblika $U(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$ gdje je r udaljenost između elektrona i jezgre (protona u slučaju atoma vodika). Budući da vrijedi $m(\text{proton}) \gg m(\text{elektron})$, može se pretpostaviti da pozitivan naboj (proton) „miruje” u ishodištu koordinatnog sustava, dok je elektron u vezanom stanju u području oko jezgre. Budući da potencijalna energija ovisi samo o udaljenosti elektrona od jezgre r , jednostavnije je Schrödingerovu jednađbu rješavati prelaskom na sferne koordinate r, θ i φ . Stacionarna 3-D Schrödingerova jednađba u sfernim koordinatama ima oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + U(\vec{r}) \psi = E\psi \quad (2.53)$$

gdje je $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$. Rješavanje Schrödingerove jednađbe za vodikov atom u sfernim koordinatama svodi se na metodu separacije varijabli, tj. valna funkcija se može prikazati kao umnožak tri funkcije od kojih svaka ovisi o samo jednoj od koordinata:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (2.54)$$

gdje je:

$R(r)$ - radijalni dio valne funkcije

$\Theta(\theta)$ - polarni dio valne funkcije

$\Phi(\varphi)$ - azimutalni dio valne funkcije.

Fizikalno dozvoljena rješenja Schrödingerove jednađbe tada trebaju zadovoljavati rubne uvjete:

- $\lim_{r \rightarrow \infty} R(r) \rightarrow 0$ (jer je elektron lokaliziran u području oko jezgre atoma)
- fukcije $\Theta(\theta)$ i $\Phi(\varphi)$ trebaju poprimati konačne vrijednosti za sve vrijednosti kutova θ i φ
- $\Phi(\varphi)$ je periodična funkcija s periodom 2π .

Separacijom varijabli dobivaju se tri nezavisne diferencijalne jednađbe za funkcije $R(r)$, $\Theta(\theta)$ i $\Phi(\varphi)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right] + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} + U(r) \right] R(r) = ER(r) \quad (2.55)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta(\theta) = 0 \quad (2.56)$$

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + m_l^2 \Phi(\varphi) = 0 \quad (2.57)$$

U rješenjima diferencijalnih jednađbi za funkcije $R(r)$, $\Theta(\theta)$ i $\Phi(\varphi)$ koje zadovoljavaju rubne uvjete pojavljuju se tri parametra (kvantna broja):

$$\begin{array}{ll} n = 1, 2, 3, 4, \dots & \text{glavni kvantni broj} \\ l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1 & \text{orbitalni kvantni broj} \\ m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l & \text{magnetski orbitalni kvantni broj} \end{array}$$

Prema tome, kvantno stanje elektrona u vodikovom atomu (valna funkcija elektrona) je određena s tri kvantna broja n , l , m_l :

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \Theta_{l,m_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\varphi) \quad (2.58)$$

- radijalni dio valne funkcije $R_{n,l}(r) = e^{-\alpha r} f(r)$ gdje je $f(r)$ polinom stupnja $n-1$
- polarni dio valne funkcije $\Theta_{l,m_l}(\theta)$ – polinomi stupnja l koji sadrže potencije po $\sin \theta$ i $\cos \theta$
- azimutalni dio valne funkcije $\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{-im_l\varphi}$.

Energija vodikovog atoma ovisi samo o glavnom kvantnom broju n i dana je izrazom kao kod Bohrova modela:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad (2.59)$$

Tablica 1: Prvih nekoliko valnih funkcija vodikovog atoma

n	l	m_l	$R_{n,l}(r)$	$\Theta_{l,m_l}(\theta)$	$\Phi_{m_l}(\varphi)$
1	0	0	$\frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{(2a_0)^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{3(2a_0)^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}} \cos \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{3(2a_0)^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\varphi}$

Prosječna vrijednost fizičke veličine koja ovisi samo o koordinati r može se izračunati prema relaciji:

$$\bar{f}(r) = \int_0^{\infty} r^2 f(r) |R_{n,l}(r)|^2 dr \quad (2.60)$$

Vjerojatnost da se elektron nađe na udaljenosti $a < x < b$ od jezgre dana je s:

$$w = \int_a^b r^2 f(r) |R_{n,l}(r)|^2 dr \quad (2.61)$$

3 Metali i poluvodiči

3.1 Metali

Kod čvrstih tijela atomi su raspoređeni u kristalnu rešetku. Elektronska struktura čvrstih tijela može se predočiti na sljedeći način:

- Elektroni na unutarnjim orbitalama atoma ostaju vezani za svoje matične atome (njihova valna funkcija je lokalizirana u području matičnih atoma) i njihova kvantna stanja ostaju približno jednaka stanjima u izoliranom atomu.
- Valna funkcija valentnih atoma postaje delokalizirana (oni više nisu čvrsto vezani za matične atome), odnosno njihova kvantna stanja se znatno razlikuju od onih u izoliranom atomu. Kvantna stanja valentnih elektrona su raspoređena unutar energijskih vrpca, unutar kojih se može smatrati da se energija mijenja kontinuirano. Energijske vrpce u kojima se mogu nalaziti elektroni razdvojene su zabranjenim zonama, u kojima nema dozvoljenih energijskih razina.

Najviša energijska vrpca kod metala u kojoj još uvijek ima elektrona, vodljiva vrpca, samo je djelomično popunjena – postoje nepopunjeni energijske razine u koje elektroni mogu prelaziti. Zbog toga metali mogu voditi električnu struju i na temperaturi apsolutne nule.

Model slobodnih elektrona u metalu (model slobodnog elektronskog plina)

Najjednostavniji opis metala daje model slobodnih elektrona u metalu. Prema tom modelu, jedan ili više valentnih elektrona su izdvojeni iz matičnog atoma i mogu se slobodno kretati unutar metala. Ti elektroni ne međudjeluju s ionima kristalne rešetke niti s ostalim elektronima. Slobodni elektroni su zadržani unutar metala potencijalnom barijerom na rubovima metala, koja ih drži zarobljenima unutar volumena materijala. Pretpostavlja se da je potencijalna energija slobodnih elektrona nula unutar metala, tj. da imaju samo kinetičku energiju.

Broj vodljivih elektrona N_e u nekom uzorku izgrađenom od atoma samo jednog elementa može se odrediti pomoću relacije:

$$N_e = N_a w \quad (3.1)$$

gdje je N_a broj atoma u uzorku, a w valencija atoma danog elementa. Vrijedi:

$$N_a = \frac{m}{m_a} \quad (3.2)$$

Prema modelu slobodnih elektrona u metalu, ponašanje elektrona u metalu može se predočiti česticom u 3-D kutiji (ako se volumen metala reprezentira kockom duljine brida L). Energije takvog elektrona su dane relacijom (2.52). Međutim, kristal metala zauzima makroskopski

volumen (ovdje je duljina brida kocke $L \gg$ de Broglieva valna duljina elektrona). Budući da je volumen metala (3-D kutije) makroskopskih dimenzija, a broj elektrona u kutiji velik (reda veličine broja atoma u materijalu), postoji ogroman broj kvantnih stanja i energijskih razina u takvom sistemu, pri čemu su susjedne energijske razine veoma bliskih energija. Radi toga se energijske razine više ne mogu razmatrati kao razdvojene razine, već se energije elektrona razmatraju kao da energijske razine čine kontinuiranu raspodjelu energija.

Definira se gustoća stanja $g(E)$ – broj kvantnih stanja dn unutar infinitezimalnog energijskog intervala dE oko energije E (odnosno broj kvantnih stanja između energija E i $E + dE$) podijeljen s jediničnim intervalom energije:

$$g(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{8\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}\pi V}{h^3} \sqrt{E} \quad (3.3)$$

gdje je $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg masa elektrona, V volumen uzorka, a $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J s Planckova konstanta.

Raspodjela elektrona po različitim kvantnim stanjima pri određenoj temperaturi T dana je s Fermi-Diracovom funkcijom raspodjele. Vjerojatnost da je kvantno stanje energije E zaposjednuto pri temperaturi T :

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} \quad (3.4)$$

gdje je E_F Fermijeva energija, a $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J K⁻¹ Boltzmannova konstanta. Fermijeva energija E_F predstavlja jedan od termodinamičkih parametara sistema (kemijski potencijal). Općenito $E_F = E_F(T, N)$ gdje je N ukupni broj čestica u sistemu.

Fermijeva energija se mijenja s temperaturom prema relaciji:

$$E_F \approx E_{F0} \left[1 + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_{F0}} \right)^2 \right] \quad (3.5)$$

gdje je E_{F0} Fermijeva energija na temperaturi apsolutne nule. Međutim, za temperaturni interval od $T = 0$ K do nekoliko stotina kelvina može se uzeti da vrijedi $E_F \approx E_{F0}$ (tj. u širokom temperaturnom intervalu može se uzeti da E_F ne ovisi o temperaturi i da ima vrijednost kao na temperaturi $T = 0$ K).

Fermi-Diracova funkcija raspodjele na $T = 0$ K ima vrijednost:

$$f(E) = \begin{cases} 1 & E < E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases} \quad (3.6)$$

Na temperaturi $T = 0$ K sva stanja s energijom manjom od E_F su popunjena, dok su sva stanja s energijom većom od E_F prazna. Računa se broj elektrona dN_e koji zauzimaju

energijske razine unutar intervala energija E i $E + dE$:

$$dN_e = f(E)dn \quad (3.7)$$

gdje je $f(E)$ vjerojatnost da je energijska razina E popunjena, a dn broj kvantnih stanja unutar intervala energija E i $E + dE$. Vrijedi:

$$dn = g(E)dE \quad (3.8)$$

gdje je $g(E)$ gustoća stanja pa slijedi:

$$dN_e = f(E)g(E)dE \quad (3.9)$$

Koristeći vrijednost Fermi-Diracove funkcije raspodjele na temperaturi $T = 0$ K dobiva se:

$$E_F = \frac{1}{8} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{h^2}{m} n^{\frac{2}{3}} = 0,121 \frac{h^2}{m} n^{\frac{2}{3}} \quad (3.10)$$

gdje je n koncentracija slobodnih elektrona, a m masa elektrona. Ukupna energija elektrona koji zauzimaju energijske razine unutar intervala energija E i $E + dE$:

$$EdN_e = Ef(E)g(E)dE \quad (3.11)$$

pa je ukupna energija svih elektrona u sistemu:

$$E_{\text{tot}} = \int EdN_e = \int_0^{\infty} Ef(E)g(E)dE \quad (3.12)$$

Na temperaturi $T = 0$ K ukupna energija svih elektrona iznosi $E_{\text{tot}} = \frac{3}{5}N_eE_F$.

Prosječna energija po elektronu na temperaturi $T = 0$ K iznosi $\bar{E} = \frac{3}{5}E_F$.

Definiraju se veličine:

- Fermijeva brzina v_F - brzina koji bi imao klasični elektron čija je kinetička energija jednaka Fermijevoj energiji:

$$E_F = \frac{mv_F^2}{2} \quad (3.13)$$

- Fermijeva temperatura T_F - temperatura na kojoj klasični elektron ima termičku energiju jednaku Fermijevoj energiji:

$$E_F = kT_F \quad (3.14)$$

Izlazni rad i izlaz elektrona iz metala

Izlazni rad W_i je najmanji iznos energije koji treba dati elektronima na temperaturi apsolutne

nule da bi mogli napustiti metal. Vrijedi:

$$W_i = E_B - E_F \quad (3.15)$$

gdje je E_B potencijalna barijera, a E_F Fermijeva energija.

Schottkyev efekt je pojava snižavanja potencijalne barijere metala kada je površina metala izložena ubrzavajućem vanjskom električnom polju. U tom slučaju izlazni rad se smanjuje za iznos:

$$\Delta W_i = e \sqrt{\frac{eE}{4\pi\epsilon_0}} \quad (3.16)$$

gdje je E jakost vanjskog električnog polja, a $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C naboj elektrona.

Zagrijavanjem metala iz njega izlaze elektroni i ta se pojava naziva termionska emisija. Gustoća struje termionske emisije J dana je s:

$$J = AT^2 e^{-\frac{W_i}{kT}} \quad (3.17)$$

gdje je A konstanta koja ovisi o materijalu, W_i izlazni rad, a T temperatura. Ako se uz zagrijavanje površina metala izloži djelovanju ubrzavajućeg vanjskog električnog polja jakosti E , struja se povećava na:

$$J' = J e^{\frac{0,44\sqrt{E}}{T}} \quad (3.18)$$

gdje je J gustoća struje bez priključenog vanjskog polja.

Električna vodljivost metala

Ako se na metalni vodič priključi električno polje \vec{E} , njime poteče gustoća struje \vec{J} dana s:

$$\vec{J} = \sigma \cdot \vec{E} \quad (3.19)$$

gdje je σ vodljivost materijala. Vrijedi:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \quad (3.20)$$

gdje je ρ otpornost materijala. Na slobodne elektrone unutar metala u vanjskom električnom polju \vec{E} djeluje sila $\vec{F} = -e\vec{E}$, odnosno elektron dobiva akceleraciju $\vec{a} = -\frac{e}{m}\vec{E}$ ($\vec{F} = m\vec{a}$). Međutim, vodljivi elektroni unutar metala doživljavaju sudare (raspršuju se na vibrirajućim atomima u kristalu i nečistoćama unutar kristala), odnosno elektron se zbog djelovanja vanjskog polja ubrzava samo u kratkim vremenskim intervalima, nakon čega zbog sudara gubi brzinu. Uzimaju se sljedeće pretpostavke:

- Elektron se ubrzava (u prosjeku) samo za vrijeme τ – prosječno vrijeme između sudara.

- Zbog raspršenja elektrona – elektron u vanjskom polju dobije neku prosječnu brzinu u smjeru suprotnom od polja, driftnu brzinu \vec{v}_d :

$$\vec{v}_d = \vec{a}\tau = -\frac{e\tau}{m}\vec{E} \quad (3.21)$$

Za gustoću struje vrijedi:

$$\vec{J} = -en\vec{v}_d \quad (3.22)$$

pa je:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (3.23)$$

gdje je e naboj elektrona, n koncentracija slobodnih elektrona u metalu, τ prosječno vrijeme između sudara elektrona, a m masa elektrona. Definiira se pokretljivost elektrona u metalu μ kao:

$$\mu = \frac{e\tau}{m} \quad (3.24)$$

pa je:

$$\sigma = ne\mu \quad (3.25)$$

Prema tome, driftna brzina v_d je brzina usmjerenog gibanja elektrona pod utjecajem vanjskog električnog polja E (odnosno dodatna brzina koja se superponira na nasumično gibanje elektrona unutar metala zbog djelovanja vanjskog električnog polja) i vrijedi:

$$v_d = \mu E = \frac{eE}{m}\tau \quad (3.26)$$

3.2 Poluvodiči

Za razliku od metala, kod poluvodiča na temperaturi apsolutne nule vrpca najveće energije koja je potpuno ispunjena elektronima (valentna vrpca) ujedno je i vrpca najveće energije koja sadrži elektrone. Sljedeća energijska vrpca (vodljiva vrpca) na temperaturi $T = 0$ K ne sadrži niti jedan elektron. Vodljiva i valentna vrpca razdvojene su tzv. zabranjenom vrpcom. Zato poluvodiči ne vode struju na temperaturi apsolutne nule. Povećanjem temperature, valentni elektroni, koji stvaraju vezu između susjednih atoma u poluvodiču, mogu apsorbirati dovoljno energije zbog termalnih vibracija atoma u rešetci, čime mogu napustiti svoje mjesto u kristalu i postati slobodni elektroni u materijalu. Odnosno, povećanjem temperature, elektron iz valentne vrpce može apsorbirati termalnu energiju i prijeći u vodljivu vrpcu. Prelaskom elektrona u vodljivu vrpcu, u valentnoj vrpici ostaje prazno kvantno stanje, koje se pri priključenju poluvodiča na vanjski napon efektivno ponaša kao pozitivan naboj i to mjesto se naziva šupljina. Prema tome, u poluvodičima postoje dvije vrste nosioca naboja – elektroni i šupljine. Tipični poluvodiči su elementi iz IV. grupe periodnog sustava elemenata:

silicij i germanij.

Razlikuju se dvije vrste poluvodiča:

- Intrinzični poluvodiči – sastoje se od atoma samo jednog elementa i kod njih je koncentracija elektrona u vodljivoj vrpici jednaka koncentraciji šupljina u valentnoj vrpici.
- Ekstrinzični poluvodiči – materijalu koji čini poluvodič dodaju se primjese kako bi se povećala koncentracija nosioca naboja u poluvodiču. Ako se dodaju donorske primjese (kao što su N, P ili As u kristalu silicija), u poluvodiču će većinski nosioci naboja biti elektroni i takvi poluvodiči se zovu N-tipovi poluvodiča. Ako se u poluvodički materijal dodaju akceptorske primjese (kao što su B, Al ili Ga u kristalu silicija), većinski nosioci u poluvodiču će biti šupljine i takvi se materijali nazivaju P-tipovi poluvodiča.

Zakon termodinamičke ravnoteže u poluvodiču zapisuje se kao:

$$n_i^2 = n_0 p_0 \quad (3.27)$$

gdje je n_i intrinzična koncentracija nosioca naboja, n_0 ravnotežna koncentracija elektrona u vodljivoj vrpici, a p_0 ravnotežna koncentracija šupljina u valentnoj vrpici.

Intrinzična koncentracija nosioca naboja u poluvodiču može se izračunati pomoću relacije:

$$n_i^2 = CT^3 e^{-\frac{E_g}{kT}} \quad (3.28)$$

gdje je C konstanta koja ovisi o materijalu, T apsolutna temperatura, E_g širina zabranjene vrpce, a $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ Boltzmannova konstanta.

Relacije (3.27) i (3.28) vrijede općenito i za intrinzične i za ekstrinzične poluvodiče.

Kod intrinzičnih poluvodiča, nosioci naboja (elektroni u vodljivoj i šupljine u valentnoj vrpici), mogu nastati jedino termičkim pobuđenjem elektrona iz valentne u vodljivu vrpcu. Stoga za intrinzični poluvodič vrijedi:

$$n_i = n_0 = p_0 \quad (3.29)$$

S druge strane, ekstrinzični poluvodiči sadrže donorske i/ili akceptorske primjese te kod njih prevladava jedan tip nosioca naboja. Donorski i akceptorski atomi se ioniziraju u materijalu: donorski atomi postaju pozitivni ioni, budući da predaju elektron materijalu, a akceptorski atomi postaju negativni ioni, budući da primaju elektron iz materijala. S obzirom na to da poluvodič kao cjelina treba biti električki neutralan, za ekstrinzične poluvodiče vrijedi:

$$n_0 + N_A = p_0 + N_D \quad (3.30)$$

gdje je N_A koncentracija akceptorskih primjesa, a N_D koncentracija donorskih primjesa. Općenito, ravnotežna koncentracija elektrona u vodljivoj vrpici se računa kao:

$$n_0 = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} \quad (3.31)$$

gdje je N_C efektivna gustoća kvantnih stanja u vodljivoj vrpici, E_C energija dna vodljive vrpce, a E_F Fermijeva energija u poluvodiču. Efektivna gustoća kvantnih stanja u vodljivoj vrpici se računa kao:

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.32)$$

gdje je m_e^* efektivna masa elektrona.

S druge strane, ravnotežna koncentracija šupljina u valentnoj vrpici se računa kao:

$$p_0 = N_V e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}} \quad (3.33)$$

gdje je N_V efektivna gustoća kvantnih stanja u valentnoj vrpici, E_F Fermijeva energija u poluvodiču, a E_V energija vrha valentne vrpce.

Efektivna gustoća kvantnih stanja u valentnoj vrpici se računa kao:

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.34)$$

gdje je m_h^* efektivna masa šupljina. Ako se za nultu razinu energije stavi vrh valentne vrpce, tj. uzme $E_V = 0$, tada (uz $E_C - E_V = E_g$) relacije (3.31) i (3.33) postaju:

$$n_0 = N_C e^{\frac{E_F - E_g}{kT}} \quad (3.35)$$

$$p_0 = N_V e^{-\frac{E_F}{kT}} \quad (3.36)$$

Za intrinzični poluvodič vrijedi $n_0 = p_0$ pa ako se izjednače relacije (3.31) i (3.33) može se odrediti položaj Fermijevog nivoa u poluvodiču:

$$E_F = E_V + \frac{1}{2}E_g - \frac{3}{4}kT \ln \left(\frac{m_e^*}{m_h^*} \right) \quad (3.37)$$

Za $m_e^* \approx m_h^*$ slijedi:

$$E_F = E_V + \frac{1}{2}E_g \quad (3.38)$$

odnosno Fermijev nivo leži u sredini zabranjenog pojasa (za instrinzični Si i Ge: m_e^* je nešto malo veći od m_h^* i E_F je malo pomaknut prema valentnoj vrpici).

Kod ekstrinzičnih poluvodiča slobodni nosioci naboja nastaju na dva načina: ionizacijom dopanata i termalnim pobuđivanjem elektrona iz valentne vrpce u vodljivu vrpcu. Na sobnoj temperaturi su svi dopanti ionizirani: donorski atomi predaju elektrone u vodljivu vrpcu, a

akceptorski atomi primaju elektrone (nastaju šupljine u valentnoj vrpici).

a) Za N-tip poluvodiča (uz $N_A=0$) vrijedi:

- na sobnoj temperaturi i temperaturama manjim od sobne ($T \leq 300$ K) vrijedi $n_0 \approx N_D$, $p_0 = \frac{n_i^2}{n_0}$ ($n_0 \gg p_0$)
- iz $n_0 = N_C e^{\frac{E_F - E_G}{kT}}$ i $n_0 \approx N_D$ slijedi

$$E_F = E_C - kT \ln \left(\frac{N_C}{N_D} \right) \quad (3.39)$$

kod N-tipa poluvodiča je Fermijev nivo pomaknut prema vodljivoj vrpici

b) Za P-tip poluvodiča (uz $N_D=0$) vrijedi:

- na sobnoj temperaturi i temperaturama manjim od sobne ($T \leq 300$ K) vrijedi $p_0 \approx N_A$, $n_0 = \frac{n_i^2}{p_0}$ ($n_0 \ll p_0$)
- iz $p_0 = N_V e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}}$ i $p_0 \approx N_A$ slijedi

$$E_F = E_V + kT \ln \left(\frac{N_V}{N_A} \right) \quad (3.40)$$

kod P-tipa poluvodiča je Fermijev nivo pomaknut prema valentnoj vrpici.

Ukupna gustoća struje u poluvodiču je dana zbrojem gustoća struja elektrona i šupljina:

$$J = n_o e (v_d)_e + p_o e (v_d)_h \quad (3.41)$$

gdje je e elementarni naboj, $(v_d)_e$ driftna struja elektrona, a $(v_d)_h$ driftna struja šupljina.

Vrijedi:

$$(v_d)_e = \mu_e E \quad (3.42)$$

$$(v_d)_h = \mu_h E \quad (3.43)$$

gdje je μ_e pokretljivost elektrona u vodljivoj vrpici, μ_h pokretljivost šupljina u valentnoj vrpici, a E jakost vanjskog električnog polja.

Kako je $J = \sigma E$, za vodljivost poluvodiča vrijedi:

$$\sigma = n_o e \mu_e + p_o e \mu_p \quad (3.44)$$

Slično kao i za metale, otpornost poluvodiča ρ se računa prema relaciji:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \quad (3.45)$$

3.3 Poluvodička dioda

Poluvodička dioda je elektronički element koji se sastoji od P-tipa i N-tipa poluvodiča u električnom kontaktu. Dioda ima raznoliku primjenu u elektroničkim spojevima, gdje se može koristiti kao sklopka, element za ispravljanje napona, optoelektronički element itd. Razlikuje se propusna i nepropusna polarizacija poluvodičke diode u strujnim krugovima. Ako se dioda spoji na izvor istosmjernog napona na način da je P strana diode na višem potencijalu od N strane, u vođenju struje sudjeluju većinski nosioci naboja (šupljine na P strani i elektroni na N strani) te diodom prolazi struja. Ovakav tip polarizacije naziva se propusnom polarizacijom diode. S druge strane, ako je N strana diode na višem potencijalu od P strane, kroz diodu prolazi samo struja malog iznosa, koja potječe od manjinskih nosioca naboja (elektrona u P-tipu i šupljina u N-tipu poluvodiča). U ovom se slučaju kaže da je dioda nepropusno polarizirana te se struja kroz diodu tada najčešće može zanemariti (za Ge diode je struja nepropusne polarizacije reda veličine μA , a za Si diode nA). Ako se diodu spoji na vanjski izvor istosmjernog napona U , struja kroz diodu može se računati prema relaciji:

$$I = I_S \left(e^{\frac{U}{U_T}} - 1 \right) \quad (3.46)$$

gdje je I_S struja manjinskih nosioca naboja, a:

$$U_T = \frac{kT}{e} \quad (3.47)$$

Predznak napona U uzima se na sljedeći način:

- za propusno polarizirani PN spoj $U > 0$
- za nepropusno polarizirani PN spoj $U < 0$

Propusna polarizacija poluvodičke diode:

Za temperaturu $T = 300\text{ K}$ vrijedi da je $\frac{kT}{e} = 25,875\text{ mV}$. Tada je $U \gg \frac{kT}{e}$ za napone $U \geq 0,1\text{ V}$ i $e^{\frac{eU}{kT}} \gg 1$ pa se može pisati:

$$I = I_S e^{\frac{eU}{kT}} \quad (3.48)$$

odnosno struja pokazuje eksponencijalnu ovisnost o priključenom naponu.

Nepropusna polarizacija poluvodičke diode:

Budući da je $U < 0$ na temperaturama bliskim sobnoj ($T = 300\text{ K}$, $\frac{kT}{e} = 25,875\text{ mV}$) vrijedi $e^{\frac{eU}{kT}} \ll 1$ pa je $I \approx -I_S$ (kroz diodu prolazi samo struja manjinskih nosioca naboja).

Struja manjinskih nosioca naboja se može izračunati prema relaciji:

$$I_S = Sen_i^2 \left(\frac{D_h}{N_D L_h} + \frac{D_e}{N_A L_e} \right) \quad (3.49)$$

gdje je:

S - površina presjeka PN spoja

n_i - intrinzična koncentracija nosioca naboja

D_h - difuzijska konstanta šupljina

D_e - difuzijska konstanta elektrona

N_D - koncentracija donorskih primjesa na N-strani

N_A - koncentracija akceptorskih primjesa na P-strani

L_h - difuzijska duljina šupljina

L_e - difuzijska duljina elektrona.

Za difuzijske duljine vrijede relacije:

$$L_h = \sqrt{D_h \tau_h} \quad (3.50)$$

$$L_e = \sqrt{D_e \tau_e} \quad (3.51)$$

gdje τ označava vrijeme života manjinskih nosioca naboja: τ_e vrijeme života elektrona na P-strani, a τ_h vrijeme života šupljina na N-strani. Difuzijske konstante elektrona i šupljina se računaju pomoću relacija:

$$D_h = \mu_h \frac{kT}{e} \quad (3.52)$$

$$D_e = \mu_e \frac{kT}{e} \quad (3.53)$$

gdje je μ_h pokretljivost šupljina u valentnoj vrpici, a μ_e pokretljivost elektrona u vodljivoj vrpici.

3.4 Hallov učinak

Razmatra se pravokutna pločica poluvodiča ili metala kroz koju prolazi struja i na koju djeluje vanjsko magnetsko polje \vec{B} orijentirano okomito na ravninu uzorka. U tom slučaju na nosioce naboja q djeluje Lorentzova sila zbog koje dolazi do nakupljanja nosioca naboja uz rub poluvodiča. Posljedica toga je uspostavljanje elektrostatskog polja \vec{E}_H i Hallova napona U_H kao razlike potencijala između nasuprotnih rubova pločice. Polaritet Hallova napona ovisi o predznaku nosioca naboja. U ravnoteži je rezultanta Lorentzove sile i elektrostatske

sile koja djeluje na nosioce naboja zbog uspostave električnog polja \vec{E}_H jednaka nuli:

$$\vec{F}_L + \vec{F}_e = 0 \quad (3.54)$$

$$q\vec{v}_d \times \vec{B} + q\vec{E}_H = 0 \quad (3.55)$$

gdje je \vec{v}_d driftna brzina nosioca naboja. Gustoća struje dana je s:

$$\vec{J} = nq\vec{v}_d \quad (3.56)$$

gdje je n koncentracija nosioca naboja pa vrijedi:

$$\vec{E}_H = -\frac{1}{nq} \vec{J} \times \vec{B} \quad (3.57)$$

Hallova konstanta R_H definira se kao:

$$R_H = \frac{1}{nq} \quad (3.58)$$

Ako se Hallov napon uvede kao:

$$E_H = \frac{U_H}{h} \quad (3.59)$$

gdje je h širina pločice te izrazi gustoća struje pomoću struje I i debljine pločice d :

$$J = \frac{I}{hd} \quad (3.60)$$

dobiva se:

$$U_H = -\frac{BR_H}{d} I \quad (3.61)$$

Hallov napon U_H , struja I i magnetsko polje B su veličine koje se mjere izravno u eksperimentu, što omogućava da se iz relacije (3.61) odredi Hallova konstanta R_H , a time i predznak i koncentracija nosioca naboja. Hallova konstanta se može izraziti pomoću pokretljivosti nosioca naboja μ i provodnosti materijala σ . Iz relacija:

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (3.62)$$

$$\vec{v}_d = \mu \vec{E} \quad (3.63)$$

slijedi:

$$\sigma = \mu R_H \quad (3.64)$$

pri čemu je električno polje \vec{E} polje koje stvara struju I kroz pločicu, a ne Hallovo električno polje.

Literatura

1. Državni zavod za mjeriteljstvo: *Pravilnik o izmjenama Pravilnika o mjernim jedinicama*, Narodne novine 16/2020
2. Haken H., Wolf H. C., *Atomic and Quantum Physics*, 2nd ed., Springer-Verlag, 1984.
3. Kasap S. O., *Principles of Electronic Materials and Devices*, McGraw-Hill, New York, 2002.
4. Krane K. S.: *Modern Physics*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1996. (3rd ed., 2012.)
5. Young H. D., Freedman R. A., *University Physics*, Addison-Wesley Inc, San Francisco, 1996. (13th ed., 2012.)