

Atomi, molekule, jedra

B. Golli, PeF

1. december 2020

Kazalo

1	Vodikov atom	5
1.1	Modeli vodikovega atoma	5
1.2	Schrödingerjeva enačba za vodikov atom	5
	Nastavek za valovno funkcijo.	5
	Gibanje težišča.	6
	Osnovno stanje.	6
	Radialno vzbujena stanja	8
	Vzbujena stanja z neničelno tirno vrtilno količino.	8
1.3	Sevalni prehodi	9
	*Spontana emisija.	12
	Izbirna pravila.	13
1.4	Atom v magnetnem polju (Zeemanov pojav)	14
	Klasična obravnava.	14
	Kvantna slika.	15
2	Atomi z več elektroni	15
2.1	Helijev atom	15
2.2	Periodni sistem elementov	18
	Litijev in težji atomi.	18
	Izključitveno načelo in spin	18
	Energije orbital.	19
	Polnjenje podlupin.	20
	Konfiguracije.	21
2.3	Kemijske lastnosti elementov	23
	Periodni sistem.	23
	Kemijske lastnosti.	23
2.4	Spektri atomov	25
	Vzbujena stanja.	25

	Rentgenski spektri.	25
	Moseleyev zakon.	25
2.5	*Polna vrtilna količina	26
	Polna vrtilna količina elektrona.	26
	Fina struktura spektralnih črt.	27
	Polna vrtilna količina pri atomih z več elektroni.	28
	Spektroskopske oznake.	29
	Ortohelij in parahelij.	29
3	Molekule	30
3.1	Vezi med atomi	30
	Ionska vez.	30
	Kovalentna vez.	30
	Kovalentna vez v molekuli H_2^+	30
	Molekula H_2	31
	Kovalentna vez in žlahtni plini.	32
	Kompleksne molekule.	32
3.2	Rotacijska vzbujena stanja.	34
	Energije vzbujenih stanj	34
	Rotacijski spekter.	34
	Vibracijska vzbujena stanja.	35
	Vibracijski spekter dvoatomnih molekul.	36
	Toplogredni pojav.	36
3.3	Elektronska vzbujena stanja.	37
	Značilne energije.	37
	Elektronsko vibracijski spektri.	37
	Fluorescenca.	37
	Fosforescenca.	37
3.4	Zasedenost stanj v segretem plinu.	38
4	Zgradba jedra	40
4.1	Gradniki	40
	Odkritje nevtrona.	40
	Masno število, oznake jeder.	40
	Izotopi.	41
	Izobari	41
4.2	Velikost jedra	41
4.3	Sila med nukleoni	43
4.4	Stabilnost jeder	44
4.5	Vrtilna količina	44
	Jedrska magnetna resonanca.	44
4.6	Vezavna energija	45

	Masni spektrograf.	45
4.7	Semiempirična (Weizsäckerjeva) masna enačba	46
	Notranja (volumska) energija.	46
	Površinska energija.	47
	Coulombska energija.	47
	Mešalna energija.	47
	Paritvena energija.	48
4.8	Stabilni izotopi.	48
5	Jedrski razpadi	50
5.1	Razpad gama	50
	Enodelčna vzbujena stanja.	50
	Vibracijski in rotacijski spektri.	50
5.2	Razpad beta	51
5.3	Razpad alfa	51
5.4	Radioaktivni nizi	53
5.5	Aktivnost	53
6	Jedrske reakcije	55
6.1	Reakcijska energija	55
6.2	Razcep urana (jedrska fizija)	55
	Verižna reakcija.	56
	Jedrski reaktor.	57
6.3	Jedrsko zlivanje (fuzija)	57
	Nastanek težjih elementov	58
	Kontrolirana fuzija.	59
7	Delci	61
7.1	Klasifikacija delcev	61
7.2	Interakcije	62
7.3	Zgradba mezonov in barionov	62
	Nukleoni so sestavljeni delci.	62
	Multiplieti barionov in mezonov.	63
	Zgradba nukleona.	63
	Mezoni.	63
	Novo kvantno število – barva.	63
7.4	Močna interakcija	64
	Gluoni.	64
	Sila med kvarkom in antikvarkom.	65
	Sile med barioni in mezoni.	66
7.5	Mase kvarkov in nukleonov	66
	Masa nukleona.	67

	Stabilnost protona.	68
7.6	Standardni model	69
	Kvarki in leptoni.	69
	Bozoni.	70
	Higgs.	70

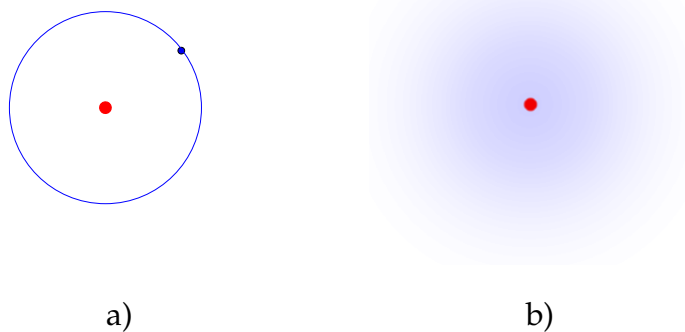
1 Vodikov atom

1.1 Modeli vodikovega atoma

Vodikov atom je najpreprostejši atom v naravi in je osnova za razumevanje atomov z več elektroni, periodnega sistema elementov in kompleksnejših večdelčnih struktur.

Zgodovinsko gledano je bil vodikov atom preskusni kamen za številne poskuse pri iskanju teorije, ki bi bila sposobna opisati lastnosti mikroskopskega sveta. Pri *Osnovah moderne fizike (OMF)* smo spoznali nekatere modele od Thomsonovega modela slivovega pudinga do Bohrovega modela. Bohrov model je uspešno napovedal energijske nivoje v vodikovem atomu in spekter svetlobe, ki jo oddaja vodikov atom. Vendar je bila slika atoma povsem napačna, saj se elektroni ne gibljejo po krožnicah. Prav tako Bohr ni uspel pojasniti fizikalnega ozadja svojih predpostavk.

Pravilno sliko da le kvantna mehanika (glej sliko 1). Elektron opišemo z valovno



Slika 1: V Bohrovem modelu elektron kroži okoli protona (a), kvantnomehansko lahko govorimo le o verjetnosti, da se elektron nahaja na določeni razdalji od protona. Verjetnostno gostoto ponazorimo z oblakom (b).

funkcijo. Kvadrat valovne funkcije interpretiramo kot verjetnostno gostoto, da se elektron nahaja v izbrani točki prostora. Za produkt nedoločenosti oddaljenosti od protona in velikosti gibalne količine v osnovnem stanju velja $\sigma_r \sigma_p = \hbar$. Velikost atoma je primerljiva z velikostjo atoma v Bohrovi sliki.

1.2 Schrödingerjeva enačba za vodikov atom

Nastavek za valovno funkcijo. Pri osnovah smo zapisali Schrödingerjevo enačbo za poljuben potencial v treh razsežnostih. V primeru vodikovega atoma je to potencial med točkastima protonom in elektronom. Enačba ima obliko

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \Psi(\vec{r}, t),$$

pri čemer je m_e masa elektrona. V stacionarnem primeru je energija konstantna in lahko zapišemo

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}. \quad (1.1)$$

Stacionarna enačba ima obliko

$$E\psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(\vec{r}).$$

Enačbo rešujemo z nastavkom

$$\psi(\vec{r}) = R(r)\Phi(\vartheta, \varphi),$$

kjer so r, ϑ, φ krogelne koordinate. Ker je potencial krogelno simetričen, je funkcija Φ , ki podaja odvisnost od kotov, enaka za vse krogelno simetrične potenciale. Pri OMF smo rešitev izrazili s krogelnimi funkcijami

$$\Phi(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l. \quad (1.2)$$

Funkcija $R(r)$, odvisna le od razdalje do izhodišča (protona), pa zadošča enačbi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R(r) = ER(r), \quad (1.3)$$

pri čemer smo eksplicitno izpisali Laplaceov operator v odvisnosti od r . Robni pogoj zahteva le, da gre funkcija proti 0, ko gre r proti neskončnosti.

Gibanje težišča. Pri zapisu Schrödingerjeve enačbe smo predpostavili, da se elektron giblje okoli protona, ki miruje v središču koordinatnega sistema. Takšna predpostavka je upravičena pri približnem računu, saj je masa protona 2000 krat večja od mase elektrona. Pri točnem računu pa moramo upoštevati, da se oba delca gibljeta okoli skupnega težišča. Gibanje razstavimo na gibanje težišča in na relativno gibanje elektrona glede na proton. Težišče se giblje premo enakomerno, saj na sistem ne deluje nobena zunanja sila. Za relativno gibanje pa dobimo enako enačbo kot (1.3), la da v njej nastopa *reducirana masa* elektrona in protona namesto elektronove mase. Reducirana masa

$$m^* = \frac{m_e m_p}{m_p + m_e} = m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p + m_e} \right) \approx m_e (1 - 0,0005).$$

se le malenkost razlikuje od mase elektrona, zato bomo pri naših približnih računih uporabljali kar maso elektrona.

Osnovno stanje. V osnovnem stanju je energija najnižja, zato je smiselno izbrati $l = 0$, saj v tem primeru delec nima rotacijske energije, ki je sorazmerna z $l(l+1)$. Enačbo (1.3) brez drugega člena poskusimo rešiti s priljubljenim nastavkom $R(r) = Ae^{-\lambda r}$. Po dvakratnem odvajanju dobimo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\lambda^2 Ae^{-\lambda r} - \frac{2\lambda}{r} Ae^{-\lambda r} \right) - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} Ae^{-\lambda r} = E Ae^{-\lambda r}.$$

Okrajšamo $Ae^{-\lambda r}$ in izenačimo konstantna člena ter člena, ki vsebujeta $1/r$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \lambda^2 = E \quad \text{ter} \quad \frac{\hbar^2}{2m_e} 2\lambda - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} = 0.$$

Iz druge enačbe sledi

$$\lambda = \frac{e_0^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = \frac{1}{r_B},$$

torej ravno recipročni Bohrov radij. Za energijo dobimo

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \lambda^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e r_B^2} = -\frac{e_0^2}{8\pi\epsilon_0 r_B} = E_1 = -13,6 \text{ eV},$$

kar je enako eksperimentalni ionizacijski energiji kot tudi energiji, ki smo jo izračunali v Bohrovem modelu.

Celotna valovna funkcija

$$\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{00}(\vartheta, \varphi) = A e^{-\lambda r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

mora biti normirana:

$$\begin{aligned} \int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R(r)^2 \frac{1}{4\pi} r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \\ &= \frac{A^2}{4\pi} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/r_B} r^2 dr \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= 1. \end{aligned}$$

Integral po kotih prinese ravno 4π , integral po r pa uženemo s substitucijo $u = -2r/r_B$. Dobimo

$$A^2 \left(\frac{r_B}{2}\right)^3 \int_0^\infty u^2 e^{-u} du = A^2 \left(\frac{r_B}{2}\right)^3 2 = 1, \quad A = \frac{2}{\sqrt{r_B^3}}.$$

Verjetnostna gostota

$$w(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 = \frac{1}{\pi r_B^3} e^{-2r/r_B}$$

eksponentno pada z oddaljenostjo od izhodišča (Slika 2). Smiselno je definirati *radialno* verjetnostno gostoto, ki je povezana s porazdelitvijo verjetnosti, da se elektron nahaja znotraj krogelne lupine s polmerom r in debelino dr :

$$\tilde{w}(r) = \frac{dP}{dr} = r^2 R(r)^2.$$

Radialna verjetnostna gostota je normirana kot

$$\int_0^\infty \tilde{w}(r) dr = \int_0^\infty R(r)^2 r^2 dr = 1.$$

V primeru osnovnega stanja dobimo

$$\tilde{w}(r) = \frac{4}{r_B^3} r^2 e^{-2r/r_B}.$$

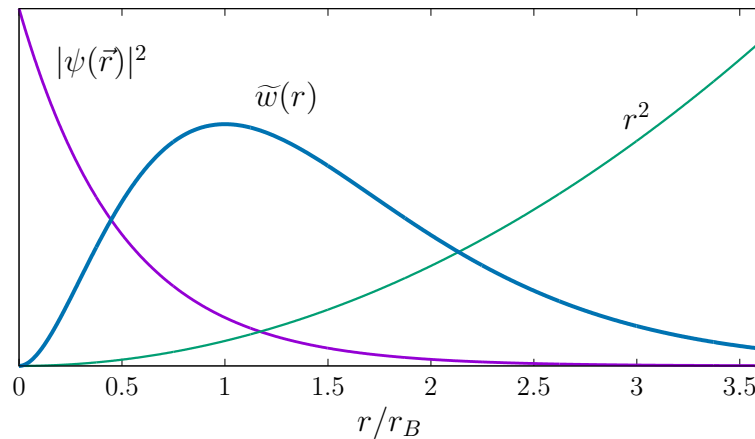
Pri majhnih r narašča kot r^2 , saj se večja površina krogelne lupine, pri večjih r pa prevlada eksponentno pojemajoča funkcija (Slika 2). Radialna gostota doseže maksimum pri r_0 , za katerega velja:

$$\left. \frac{d\tilde{w}(r)}{dr} \right|_{r=r_0} = 0.$$

Dobimo

$$\frac{4}{r_B^3} \left(2re^{-2r/r_B} - r^2 \frac{2}{r_B} e^{-2r/r_B} \right) \Big|_{r=r_0} = 0, \quad \text{torej} \quad r_0 = r_B.$$

Elektron se torej z največjo verjetnostjo nahaja na razdalji od protona, ki je enaka ravno oddaljenosti, pri kateri bi v Bohrovi sliki krožil okoli protona.



Slika 2: Verjetnostna gostota $|\psi(\vec{r})|^2$ za elektron v osnovnem stanju in radialna verjetnostna gostota $\tilde{w}(r) = 4\pi r^2 |\psi(\vec{r})|^2 = r^2 R(r)^2$.

Radialno vzbujena stanja Ostanimo še pri stanjih, pri katerih sta vrtilna količina in rotacijska kinetična energija enaki 0. Na podlagi izkušenj z vzbujenimi stanji v ravni jami sklepamo, da bo imela višja vzbujena stanja vozle, enega, dva, tri, ...; po analogiji jim pripišemo kvantna števila $n = 2, 3, 4, \dots$, osnovno stanje pa naj ustreza $n = 1$. Hitro se lahko prepričamo, da funkcija

$$R_{n=2,l=0}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}r_B^3} \left(1 - \frac{r}{2r_B} \right) e^{-r/2r_B},$$

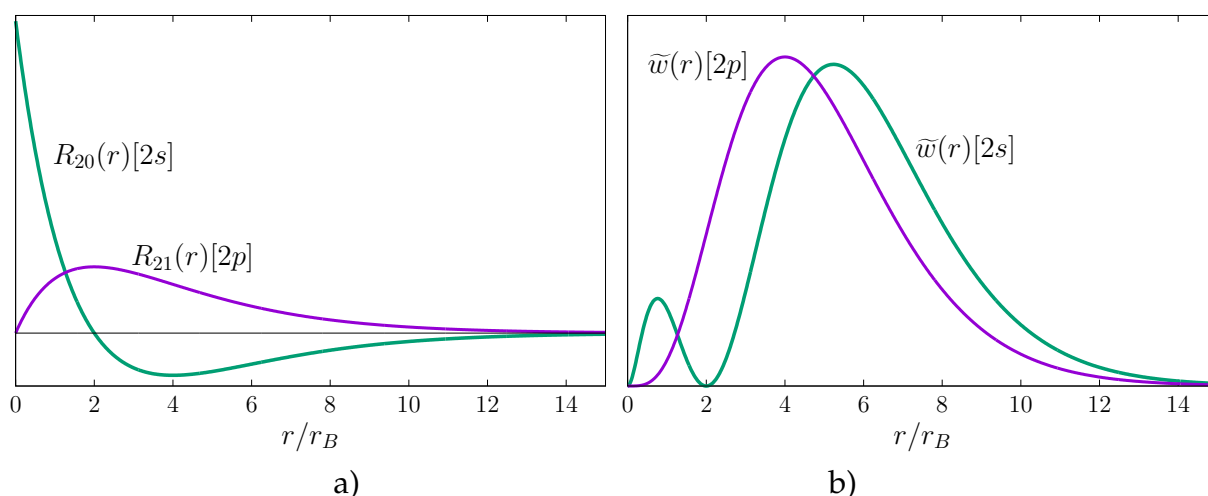
ki ima vozlel pri $r = 2r_B$, reši (1.3) z energijo $E_2 = \frac{1}{4}E_1$. Za $n = 3$ ima valovna funkcija dva vozla:

$$R_{n=3,l=0}(r) = \frac{2}{\sqrt{27}r_B^3} \left(1 - \frac{2r}{3r_B} + \frac{2r^2}{27r_B^2} \right) e^{-r/3r_B},$$

in energijo $E_3 = \frac{1}{9}E_1$. V splošnem velja $E_n = \frac{1}{n^2}E_1$, pri čemer je n glavno kvantno število, enako številu vozlov n_r povečanim za 1: $n = n_r + 1$. Enačba je enaka kot v Bohrovem modelu.

Vzbujena stanja z neničelno tirno vrtilno količino. Pri stanjih z $l \geq 1$ valovna funkcija ni več krogelno simetrična, pač pa je odvisna od smeri. Odvisnost podajajo krogelne funkcije $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, ki smo jih zapisali že v Osnovah. Funkcije so normirane:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_{lm}|^2 \sin \vartheta \, d\vartheta d\varphi = 1.$$



Slika 3: (a) Radialna dela valovne funkcije elektrona v stanjih z $n = 2$ ter $l = 0$ ($2s$) in $l = 1$ ($2p$) in (b) pripadajoči radialni verjetnostni gostoti.

Pri izbranem l imajo radialne valovne funkcije $R(r)$ nič, enega, dva, tri, ... vozlov. V tem primeru je glavno kvantno število n , ki določa energijo, enako vsoti števila vozlov n_r in kvantnega števila l , povečanega za ena:

$$n = n_r + l + 1 \quad \text{in velja} \quad E_n = \frac{E_1}{n^2}, \quad E_1 = -13,6 \text{ eV}.$$

V splošnem določajo stanje elektrona v vodikovem atomu tri kvantna števila:

n glavno kvantno število – določa energijo stanja, $n = 1, 2, 3, \dots$,

l tirno kvantno število – določa velikost tirne vrtilne količine $\Gamma = \hbar \sqrt{l(l+1)}$; $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$,

m magnetno kvantno število oz. kvantno število tretje komponente vrtilne količine, $\Gamma_z = \hbar m$, $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \pm l$.

Stanju elektrona v atomu popularno pravimo tudi *orbitala*. Valovno funkcijo splošnega stanja zapišemo kot

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

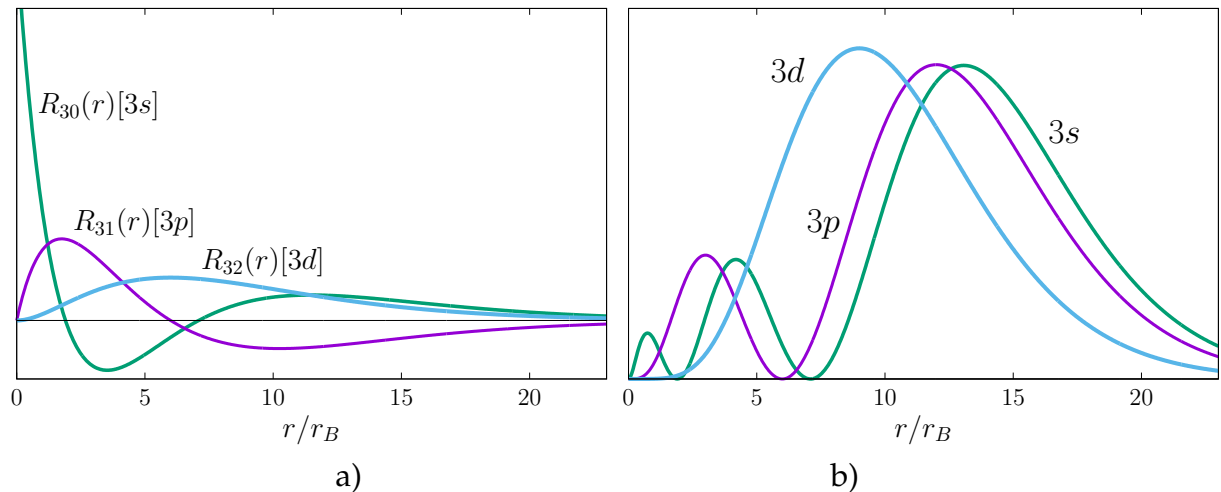
preglednici so zapisane nekatere valovne funkcije z $l \geq 1$.

1.3 Sevalni prehodi

Klasično naboje seva, ko se giblje pospešeno. Pri dipolnih prehodih je jakost izsevane svetlobe odvisna od dipolnega momenta $p(t) = e_0 z(t)$. Pri tem privzamemo, da os z usmerimo v smer nihanja naboja. V kvantni mehaniki nadomestimo klasične količine z operatorji in računamo pričakovane vrednosti operatorjev. V primeru dipolnega momenta je to kar pričakovana vrednost koordinate z . Če za valovno funkcijo vzamemo

$\psi_{210} = R_{21} Y_{10}$	$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24} r_B^3} \frac{r}{r_B} e^{-r/2r_B}$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$
$\psi_{21\pm 1} = R_{21} Y_{1\pm 1}$		$Y_{1\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
$\psi_{310} = R_{31} Y_{10}$	$R_{31} = \frac{4}{27} \sqrt{\frac{2}{3} r_B^3} \frac{r}{r_B} \left(1 - \frac{r}{6r_B}\right) e^{-r/3r_B}$	
$\psi_{320} = R_{32} Y_{20}$	$R_{32} = \frac{2}{81} \sqrt{\frac{2}{15} r_B^3} \frac{r^2}{r_B^2} e^{-r/3r_B}$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$

Tabela 1: Nekatere valovne funkcije elektrona v vodikovem atomu.

Slika 4: (a) Radialne deli valovne funkcije elektrona v stanjih z $n = 3$ ter $l = 0$ (3s), $l = 1$ (3p) in $l = 2$ (3d); (b) pripadajoče radialne verjetnostne gostote.

stacionarno rešitev Schrödingerjeve enačbe, ki smo jo izpeljali v prejšnjem razdelku, dobimo

$$\langle z(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} \Psi(\vec{r}, t)^* z \Psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} \psi(\vec{r})^* e^{iEt/\hbar} z \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} z |\psi(\vec{r})|^2.$$

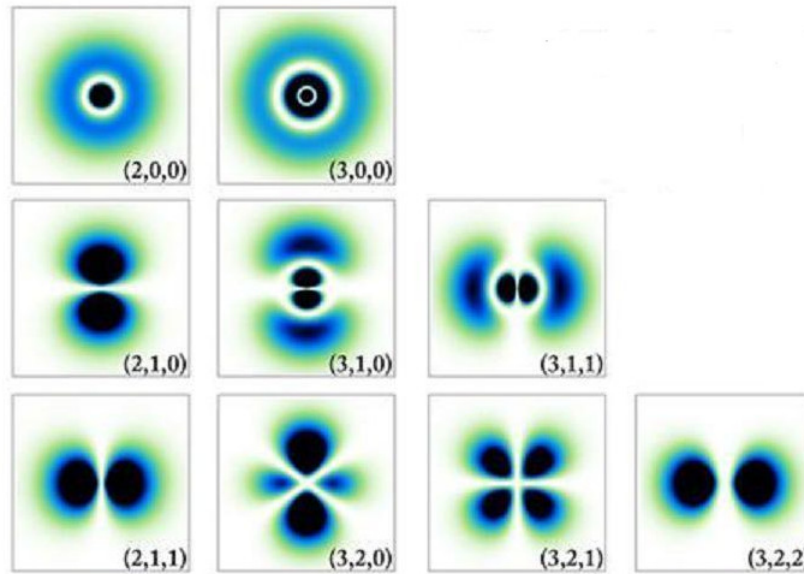
V končnem izrazu čas sploh ne nastopa, kar pomeni, da elektron ne niha in torej ne seva. S tem smo potrdili Bohrov postulat, da elektroni v stacionarnih stanjih ne sevajo.

Namesto stacionarnega stanja vzemimo vsoto dveh stacionarnih stanj z različnima energijama¹:

$$\Psi(\vec{r}, t) = c_a \psi_a(\vec{r}) e^{-iE_a t/\hbar} + c_b \psi_b(\vec{r}) e^{-iE_b t/\hbar}, \quad (1.4)$$

pri čemer a ustreza trojici kvantnih števil nlm in b trojici $n'l'm'$, $n' \neq n$. Naj bo $n > n'$, torej $E_n > E_{n'}$ oziroma $E_a > E_b$. Stanje ni stacionarno, saj je odvisno od dveh

¹Vsota dveh rešitev je tudi rešitev Schrödingerjeve enačbe, saj je enačba linearna.



Slika 5: Slike verjetnostnih gostot za stanja z $n = 2$ in $n = 3$ ter različne vrednosti za magnetno kvantno število $m \geq 0$. Oznake pomenijo (n, l, m) . Navpična simetrijska os je os z ; gostote so osno simetrične glede na os z – mislimo si lahko, da sliko gostote zavrtnimo okoli navpične simetrijske osi. Močnejši odtенок pomeni večjo verjetnostno gostoto, bela pa gostoto 0. Gostota dva krat pade na nič v stanju $(3,0,0)$ v skladu s sliko verjetnostne gostote za $3s$ na sliki 3, podobno ujemanje lahko opazujemo tudi za druge primere. https://vladimirkalitvianski.files.wordpress.com/2010/12/hydrogen_orbitals1.jpg

različnih energij. Izvrednotimo koordinato z v takšnem stanju; zaradi enostavnosti bomo privzeli, da sta oba koeficienta in krajevni valovni funkciji ψ_a in ψ_b realni²:

$$\begin{aligned} \langle z(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} \left[(c_a^2 |\psi_a(\vec{r})|^2 + c_b^2 |\psi_b(\vec{r})|^2) z \right. \\ \left. + c_a c_b \psi_a(\vec{r}) z \psi_b(\vec{r}) \left(e^{iE_a t/\hbar - iE_b t/\hbar} + e^{iE_b t/\hbar - iE_a t/\hbar} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Prva člena sta kar pričakovani vrednosti koordinate z v stacionarnih stanjih a in b . Ker so vse rešitve simetrične na zrcaljenje glede na ravnino xy , je pričakovana vrednost z enaka 0, v katerem koli stacionarnem stanju vodikovega atoma. V preostalem členu upoštevamo zvezo: $e^{iu} + e^{-iu} = 2 \cos u$, za $u = E_a t/\hbar - E_b t/\hbar$, in dobimo

$$\langle z(t) \rangle = 2c_a c_b \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} \psi_a(\vec{r}) z \psi_b(\vec{r}) \cos((E_a - E_b)t/\hbar).$$

Elektron torej niha kot

$$\langle z(t) \rangle = 2c_a c_b z_{ab} \cos \omega t, \quad \omega = \frac{E_a - E_b}{\hbar}, \quad z_{ab} = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} \psi_a(\vec{r}) z \psi_b(\vec{r}) \quad (1.6)$$

in pri tem seva svetlobo s frekvenco $\nu = \omega/2\pi$.

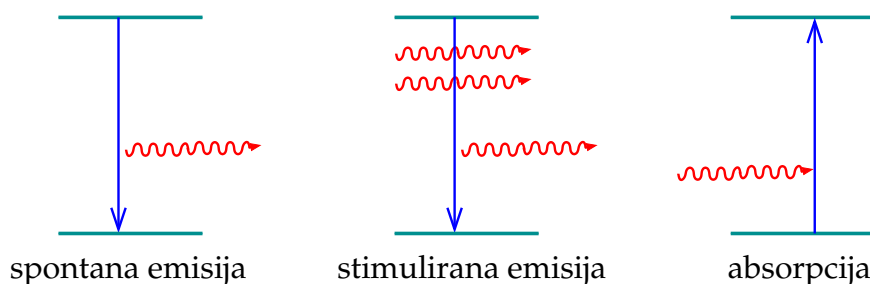
²To je res za rešitve z $m = 0$.

Izraz za ω prepišemo v obliko

$$\hbar\omega = h\nu = E_n - E_{n'} = E_1 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right).$$

Namesto o izsevani svetlobi lahko govorimo o emisiji fotona. Na levi strani je energija fotona, na desni pa razlika energij v vodikovem atomu med nivojema z glavnima kvantnima številoma n in n' . Možen je tudi obratni proces, ko se foton v atomu absorbira in pri tem atom preide iz stanja z nižjo energijo (n') v stanje z višjo energijo (n). Govorimo o absorpciji fotona oziroma svetlobe.

***Spontana emisija.** Pri pojavu absorpcije se elektron običajno nahaja v osnovnem stanju in po absorpciji preide v vzbujeno stanje. Med prehodom opišemo njegovo stanje z vsoto obeh stacionarnih stanj (1.4). Koeficienta c_a in c_b se s časom spreminjata: na začetku je elektron samo v stanju b , tako da je $c_b = 1$ in $c_a = 0$, nato se c_b zmanjšuje, c_a pa povečuje in na koncu doseže vrednost 1. Izraz c_a^2 interpretiramo kot verjetnost, da je elektron v stanju a , c_b^2 pa verjetnost, da je v stanju b ; velja $c_a^2 + c_b^2 = 1$. Čas prehoda je mnogo večji od nihajnega časa absorbirane svetlobe ($t_0 = 1/\nu$).



Slika 6: Vrste prehodov med stanji v atomu

Do obratnega procesa — emisije — pa pride tudi brez zunanega vzroka. V tem primeru govorimo o *spontani emisiji* za razliko od *stimulirane emisije*, o kateri smo govorili pri opisu delovanja laserjev v okviru Osnov moderne fizike. Tega procesa ne moremo pojasniti v okviru običajne kvantne mehanike, saj so stacionarna stanja vpeljana ravno ob predpostavki, da se opazljive količine s časom ne spreminjajo. V *kvantni elektrodinamiki* pa vzbujeno stanje ni čisto stanje enega samega elektrona, temveč vsebujejo primes osnovnega stanja elektrona in fotona ter drugih nižje ležečih elektronskih stanj in fotonov. Stanje elektrona tudi v tem primeru opisuje valovna funkcija (1.4), le da smo v našem primeru privzeli, da atom lahko preide le v eno nižje ležeče stanje. Ob nastanku vzbujenega stanja je koeficient $c_a \approx 1$, koeficient pri nižje ležečem stanju $c_b \ll 1$. Verjetnost, da je elektron v vzbujenem stanju je sorazmerna z c_a^2 in se eksponentno zmanjšuje s karakterističnim časom τ , narašča pa verjetnost, da je elektron v stanju b skupaj z emitiranim fotonom.

Nedoločenost „življenjskega“ časa vzbujenega stanja lahko ocenimo s karakterističnim časom τ . Iz načela nedoločenosti v tem primeru sledi, da tudi energija stanja ne more biti točno določena. Za nedoločenost energije velja

$$\sigma_E \geq \frac{\hbar}{\sigma_t} = \frac{\hbar}{\tau}.$$

Zaradi nedoločenosti energije vzbujenega stanja tudi energija fotona ni točno določena in prav tako njegova valovna dolžina. V spektroskopu je spektralna črta „razmazana“ – črta ima *naravno širino*. Je pa naravna širina zelo majhna, veliko manjša od razširitve črte, ki je posledica Dopplerjevega pojava zaradi različnih hitrosti atomov v razžarjenem plinu, in razširitve črte zaradi trkov.

Izbirna pravila. Jakost sevanja je odvisna od amplitude nihanja (glej (1.6)) in je sorazmerna s koeficientom z_{ab} , ki ustreza integralu koordinate z med dvema različnima stanjema. Izraz imenujemo *matrični element* za prehod med stanjem a in stanjem b . Kot zgled izračunajmo matrični element med vzbujenim stanjem $z\ n = 2, l = 0, m = 0$ in osnovnim stanjem $n' = 1, l' = 0, m' = 0$. Koordinato z zapišemo v krogelnih koordinatah kot $z = r \cos \vartheta$:

$$z_{ab} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R_{20}(r) Y_{00}(\vartheta, \varphi) r \cos \vartheta R_{10}(r) Y_{00}(\vartheta, \varphi) r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi.$$

Velja $Y_{00}(\vartheta, \varphi) = 1/\sqrt{4\pi}$ in dobimo

$$z_{ab} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty R_{20}(r) R_{10}(r) r^2 dr \int_0^\pi \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi.$$

Integral po φ da 2π , integral po ϑ pa izračunamo s substitucijo $u = \cos \vartheta$, $du = -\sin \vartheta d\vartheta$:

$$\int_0^\pi \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = - \int_1^{-1} u du = \frac{1}{2} u^2 \Big|_{-1}^1 = 0.$$

Amplituda nihanja je torej 0, kar pomeni, da elektron svetlobe oziroma fotona sploh ne izseva. Prehod med tema dvema stanjema ni mogoč, pravimo, da je tak prehod *prepovedan*.

Preverimo, kako je s prehodom, če je v vzbujenem stanju $l = 1$ namesto 0:

$$z_{ab} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R_{21}(r) Y_{10}(\vartheta, \varphi) r \cos \vartheta R_{10}(r) Y_{00}(\vartheta, \varphi) r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi.$$

V tem primeru je $Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{3/4\pi} \cos \vartheta$. Integral po φ je enak kot prej, integral po ϑ pa je v tem primeru enak:

$$\int_0^\pi \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = - \int_1^{-1} u^2 du = \frac{1}{3} u^3 \Big|_{-1}^1 = \frac{2}{3}.$$

Ker je tudi integral po r različen od 0, elektron pri prehodu seva. Prehod je mogoč; govorimo o *dovoljenih* prehodih. Pri računanju prehodov odločata integrala po kotih; izkaže se, da so od nič različni le matrični elementi med stanji, pri katerih se tirno kvantno število spremeni za 1 (bodisi poveča bodisi zmanjša), magnetno kvantno število tudi za 1 ali pa se ne spremeni:

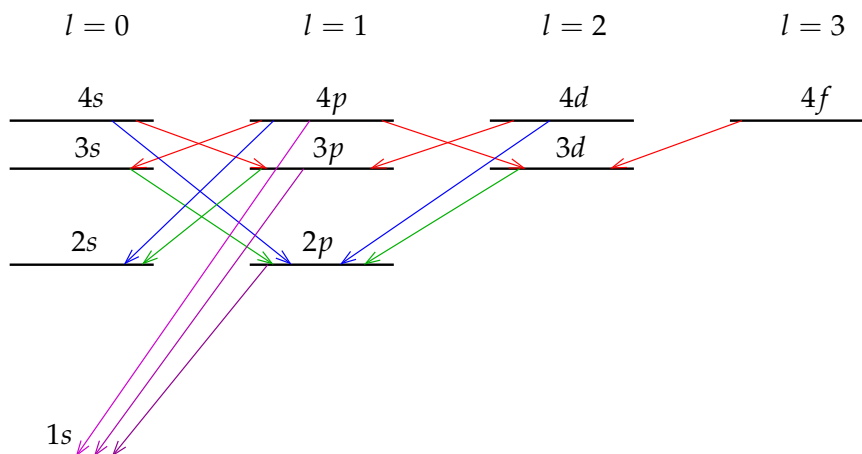
$$l - l' = \pm 1, \quad m - m' = \pm 1 \quad \text{ali} \quad 0.$$

V spektroskopiji je navada, da namesto kvantnega števila l navajamo njegovo spektroskopsko oznako:

$l =$	0	1	2	3	4	...
oznaka	s	p	d	f	g	...

Pred spektroskopsko oznako navedemo še glavno kvantno število; $3p$ tako ustreza stanju z $n = 3$, $l = 1$, $4f$ pa $n = 4$ in $l = 3$.

Možni prehodi v vodikovem atomu so nakazani na sliki 7.



Slika 7: Dovoljeni prehodi med stanji z različnimi l v vodikovem spektru za nivoje $n = 1, 2, 3, 4$. Barve so le simbolične; prehodi na nivo z $n = 1$ so v UV spektru in jih ne vidimo; prehodi na $n = 2$ so v vidnem delu spektra, prehodi na $n = 3$ pa v IR delu spektra.

1.4 Atom v magnetnem polju (Zeemanov pojav)

Klasična obravnava. V klasični (Bohrovi) sliki elektron kroži po krožnici s polmerom r . Krožeči elektron predstavlja tokovno zanko, po kateri teče tok $I = e/t_0 = -e_0/t_0$, če je t_0 obhodni čas kroženja. V magnetnem polju deluje na tokovno zanko navor $\vec{M} = I\vec{S} \times \vec{B}$. Če hočemo zanko zavrteti, opravimo delo. Če zanko vrtimo okoli osi, pravokotne na simetrijsko os, je delo enako

$$A = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} M d\varphi = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} ISB \sin \varphi d\varphi = -ISB \cos \varphi \Big|_{\varphi_1}^{\varphi_2} = -ISB \cos \varphi_2 + ISB \cos \varphi_1.$$

Delo je odvisno le od končnega in začetnega zasuka, zato lahko vpeljemo *magnetno energijo*:

$$W_m = -ISB \cos \varphi = -I\vec{S} \cdot \vec{B} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B},$$

saj je φ kot med vektorjem ploskve in vektorjem gostote magnetnega polja. V zadnjem koraku smo vpeljali *magnetni moment* zanke $\vec{\mu} \equiv I\vec{S}$. V primeru zanke, ki jo opisuje elektron pri „klasičnem“ kroženju, lahko tok izrazimo s frekvenco kroženja, frekvenco pa z vrtilno količino in vztrajnostnim momentom točkastega telesa na razdalji r od osi

kroženja. Magnetni moment kaže v smer osi kroženja, torej v isti smeri kot vrtilna količina:

$$\vec{\mu} = -S e_0 \frac{\vec{\omega}}{2\pi} = -\frac{\pi r^2 e_0 \vec{\Gamma}}{2\pi m_e r^2} = -\frac{e_0 \vec{\Gamma}}{2 m_e}.$$

Energija krožečega elektrona je potem enaka

$$W_m = \frac{e_0 \vec{\Gamma} \cdot \vec{B}}{2 m_e}.$$

Kvantna slika. V kvantni sliki lahko privzamemo izraz za magnetno energijo, s tem da količine nadomestimo z operatorji in računamo njihove pričakovane vrednosti v izbranem kvantnem stanju elektrona v atomu. Običajno os z usmerimo v smeri magnetnega polja: $\vec{B} = (0, 0, B)$ in izraz za operator magnetne energije zapišemo s komponento vrtilne količine v smeri osi z :

$$\hat{W}_m = \frac{e_0 \hat{\Gamma}_z B}{2 m_e}.$$

Pričakovano vrednost komponente vrtilne količine zapišemo kot $\Gamma_z = \hbar m$, pri čemer je m magnetno kvantno število. Pričakovano vrednost magnetne energije sedaj lahko zapišemo

$$\frac{e_0 \hbar}{2 m_e} m B = \mu_B m B, \quad \mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2 m_e},$$

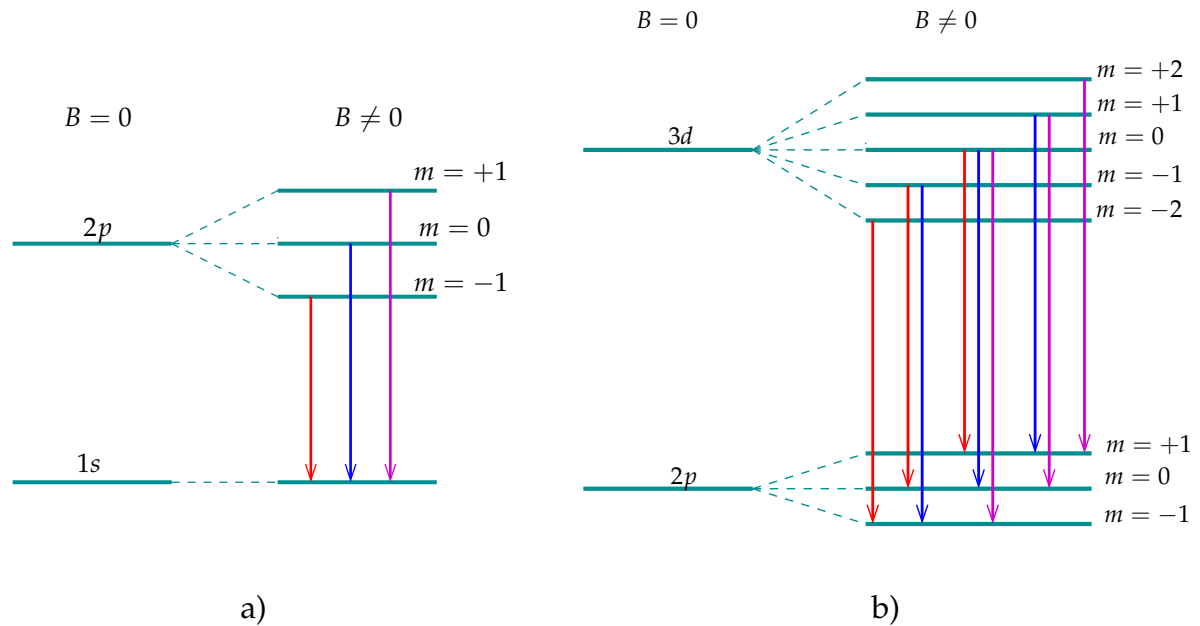
kjer smo vpeljali *Bohrov magneton* μ_B . V magnetnem polju imajo stanja z različnim m različne energije – od tod pride ime za kvantno število m . Če magnetno polje ni prisotno, imajo vsa stanja z enakim n enako energijo; če pa atom postavimo v magnetno polje, se energije stanj spremenijo; stanjem s pozitivnim m se energija poveča, stanjem z negativnim m pa zmanjša. Energijski nivo z danim n in l se razcepi na $2l + 1$ nivojev (glej sliko 8). Energijske razlike med nivoji so enake za vse vrednosti. V spektroskopu opazimo, da se črta razcepi na tri črte. Tri črte opazimo tudi pri prehodih med stanji z večjimi vrednostmi l , $l \geq 2$. Razlog je izbirno pravilo, zaradi katerega so dovoljeni le prehodi, pri katerih se m ne spremeni ali se spremeni za 1 (glej sliko 8 b)).

2 Atomi z več elektroni

V atomskem jedru so protoni in nevtralni delci – nevtroni, ki imajo maso, zelo blizu masi protona. Lastnosti atoma določa število protonov; število protonov imenujemo *vrstno število* Z . Maso atoma določa skupno število protonov in nevtronov. Vrstno število je enolično povezano s kemijskim imenom elementa. Nevtralni atom ima Z elektronov.

2.1 Helijev atom

Helijev atom ima v jedru dva protona, ki določata naboj. Nevtralni atom ima zato tudi dva elektrona. V jedru sta poleg protona še eden ali dva nevtrona, ki sta nevtralna, imata približno enako maso kot protona. Prispevata le k masi atoma, na druge



Slika 8: Razcep spektralnih črt v magnetnem polju: a) iz prvega vzbujenega stanja v osnovno, b) iz stanja z $l = 2$ v stanje z $l = 1$. Dovoljeni so le prehodi, kjer se magnetno kvantno število ne spremeni ali pa se spremeni za 1. V obeh primerih dobimo le tri različne energijske razlike in v spektroskopu vidimo razcep v tri črte.

lastnosti atoma pa ne vplivata. V naravi prevladuje helij z dvema nevtronoma. Račun energijskega spektra in valovnih funkcij je zelo kompliciran in rešitve ni mogoče zapisati v analitični obliki, kot je bilo to mogoče v primeru vodikovega atoma.

Približno oceno za energijo in velikost osnovnega stanja lahko dobimo s preprostim modelom, v katerem iz načela nedoločenosti izrazimo kinetično energijo z nedoločenostjo razdalje elektrona od jedra. Povprečno oddaljenost elektrona od jedra določimo z zahtevo, da je vsota kinetične in potencialne energije minimalna. V *Osnovah moderne fizike* smo v poglavju *Kvantna slika* kinetično energijo elektrona zapisali kot $W_{\text{kin}} = \hbar^2 / 2mr^2$. Pri zapisu potencialne energije pa moramo upoštevati, da je naboj jedra dva krat večji. Vsoto kinetične in potencialne energije za elektron v helijev atomu torej zapišemo:

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{2e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Iz zahteve $dE/dr = 0$ sledi

$$-2 \frac{\hbar^2}{2mr^3} + \frac{2e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \Big|_{r=r_{\min}} = 0, \quad r_{\min} = \frac{1}{2} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e_0^2 m} = \frac{1}{2} r_B.$$

Elektron se torej (v povprečju) nahaja na dva krat manjši razdalji kot v primeru vodikovega atoma. Energija elektrona na tej razdalji je enaka

$$E_{\min} = \frac{4\hbar^2}{2mr_B^2} - \frac{4e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} = 4E_1(\text{H}) = -54,4 \text{ eV}. \quad (2.7)$$

V primerjavi z elektronom v vodikovem atomu, je v helijevem atomu kinetična energija elektrona štiri krat večja in prav tako potencialna energija. To je razumljivo, saj je kinetična energija obratno sorazmerna s kvadratom oddaljenosti od jedra, pri potencialni energiji pa je naboj dvakrat večji, razdalja do jedra pa dva krat manjša.

V nevtralnem atomu helija sta dva elektrona, zato pričakujemo, da bo celotna energija dva krat večja, kot v primeru energija elektrona

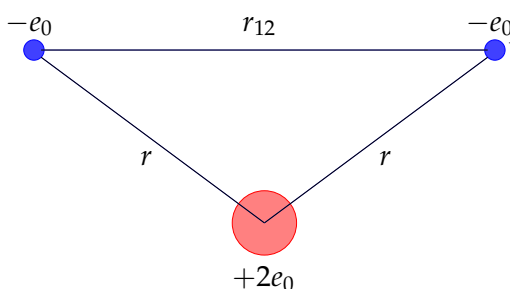
$$E(\text{He}) = 2E_{\min} = 8E_1(H) = -108,8 \text{ eV}.$$

Vendar se rezultat ne ujema z eksperimentalno vrednostjo energije, ki meri le $-79,0 \text{ eV}$. Pri poenostavljenem računu nismo upoštevali potencialno energijo med elektronoma: ker imata elektrona enako predznačen naboj, je ta energija pozitivna. Zaradi odboja pričakujemo, da bo velikost atoma večja od naše ocene, pri kateri smo odboj zanemarili. Zapišimo energijo dveh elektronov v helijevem atomu z upoštevanjem potencialne energije med njima:

$$E(\text{He}) = 2 \frac{\hbar^2}{2mr^2} - 2 \frac{2e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}},$$

pri čemer smo z r_{12} označili povprečno razdaljo med elektronoma. Pri variacijskem računu velikosti sistema je smiselno predpostaviti, da je razdalja med elektronoma sorazmerna z oddaljenostjo elektronov od jedra: $r_{12} = r/k$. V tem primeru lahko odvisnost energije od r zapišemo kot

$$E(\text{He}) = 2 \frac{\hbar^2}{2mr^2} - (4 - k) \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad k = \frac{r}{r_{12}}.$$



Slika 9: Shematični prikaz atoma helija; r_{12} je povprečna razdalja med elektronoma.

Z variacijo r dobimo za ravnovesno vrednost r

$$r_0 = \frac{2}{4 - k} r_B, \quad E(\text{He}) = 2 \left(\frac{4 - k}{2} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2mr_B^2} - \frac{(4 - k)^2}{2} \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} = \frac{(4 - k)^2}{2} E_1.$$

Ravnovesna oddaljenost se poveča, energija pa (absolutno) zmanjša. Parameter k določimo iz znane energije osnovnega stanja,

$$\frac{(4 - k)^2}{2} E_1 = E(\text{He})_{\text{eksp}}, \quad k = 4 - \sqrt{\frac{2E(\text{He})_{\text{eksp}}}{E_1}} = 0,59.$$

in od tod

$$r_{12} = \frac{r}{k} \approx 1,70 r,$$

kar pomeni, da se elektrona v povprečju nahajata skoraj na nasprotnih straneh atoma.

Energija $-79,0$ eV je energija, potrebna za odstranitev obeh elektronov. Prav tako je pomembna energija, potrebna za odstranitev le enega elektrona: v tem primeru sistem razpade na helijev ion z nabojem $+e_0$ in elektrona na veliki razdalji od iona. Energijo iona pa ni težko določiti, saj v tem primeru ni prisotna odbojna energija. Energijo enega samega elektrona v polju helijevega jedra smo že določili (glej (2.7)). Energija, potrebno za odstranitev prvega elektrona, – ionizacijska energija za He –, je enaka razliki med energijo nevtralnega atoma in iona He^+ :

$$\Delta E = |E(\text{He})| - |E(\text{He}^+)| = 79,0 \text{ eV} - 54,4 \text{ eV} = 24,6 \text{ eV}.$$

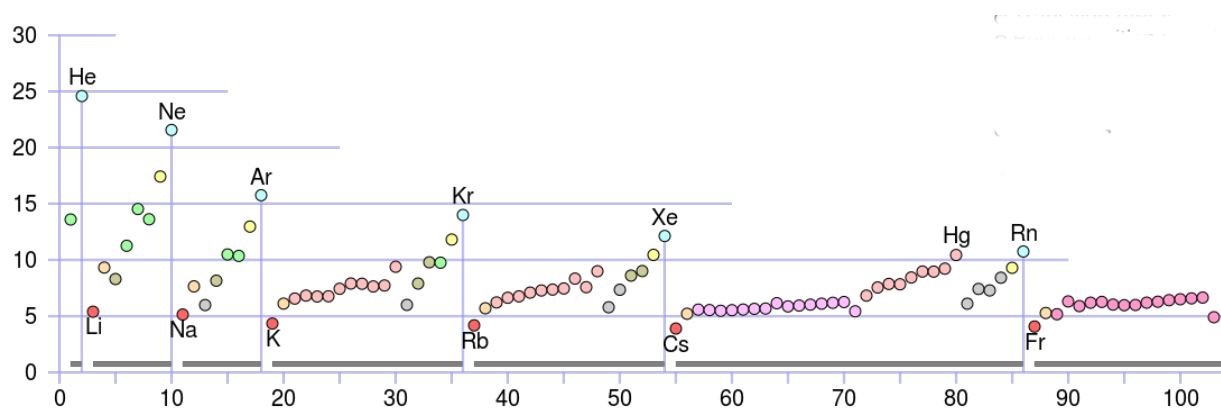
2.2 Periodni sistem elementov

Litijev in težji atomi. Če naredimo podoben račun za litijev atom, dobimo še manjšo velikost atoma v primerjavi z vodikom in helijem in še večje ionizacijske energije za prvi elektron in naslednje. Podoben trend bi dobili pri vseh atomih z večjim vrstnim številom Z . Takšna napoved je v nasprotju z eksperimentalnimi opažanji:

- Litijev atom je znatno večji od helijevega in tudi vodikovega atoma. Enako velja za večino drugih atomov.
- Ionizacijska energija za Li^+ je veliko manjša od ionizacijske energije za He^+ in vodik.
- Ionizacijska energija se močno spreminja z naraščajočim Z (glej sliko 10).
- Pojavljajo se tako imenovana *magična* vrstna števila, pri katerih ionizacijska energija močno naraste: $Z = 2, 10, 18, 36, 54, 86$, pri naslednjem elementu pa hitro pade.

Izključitveno načelo in spin Opisane lastnosti so posledica *izključitvenega načela*, ki smo ga spoznali v poglavju o sistemih delcev v okviru Osnov moderne fizike. Elektroni so *fermioni*, kar pomeni, da dva elektrona ne moreta biti hkrati v istem kvantnem stanju. Elektronske orbitale v atomih z $Z > 1$ so podobne orbitalam v vodikovem atomu in jih prav tako lahko označujemo s kvantnimi števili n , l in m . Pri izbranem n in l imamo $2l + 1$ možnih vrednosti za m . Če zahtevamo, da se elektroni razlikujejo vsaj v enem kvantnem številu, bi lahko imeli v stanjih z izbranim n in l največ $2l + 1$ elektronov. V osnovnem stanju z $n = 1$ (in $l = 0$) bi imeli lahko le en elektron. To pa je v nasprotju z našo sliko helijevega atoma, pri katerem smo postavili oba elektrona v isto stanje in dobili dobro ujemanje z eksperimentom. Neujemanje se pojavi šele pri treh elektronih. Kaže, da poleg kvantnih števil n , l in m obstaja še dodatno kvantno število, ki lahko zavzame dve vrednosti. Res, poskus pokaže³, da se v magnetnem polju

³Pri Stern-Gerlachovem poskusu se je curek atomov v osnovnem stanju po prehodu skozi *nehomogeno* magnetno polje razcepil na dva delna curka.



Slika 10: Ionizacijske energije (v eV) za prvi elektron v odvisnosti od vrstnega števila.
<https://en.wikipedia.org/wiki/>

tudi osnovno stanje razcepi na dva energijska nivoja. Govorimo o *lastni vrtilni količini* ali *spinu*⁴ in ga namesto z l označimo z s . Če privzamemo enako zvezo za število stanj, kot pri tirni vrtilni količini, iz $2s + 1 = 2$ sledi $s = \frac{1}{2}$. Dvema stanjema ustrezata kvantni števili tretje komponente spina $m_s = \frac{1}{2}$ in $m_s = -\frac{1}{2}$.

Stanja elektrona v atomu se torej razlikujejo po *štirih* kvantnih številih:

n glavno kvantno število, $n = 1, 2, 3, \dots$,

l kvantno število tirne vrtilne količine ali kar tirno kvantno število, $0 \leq l \leq n - 1$,

m kvantno število tretje komponente tirne vrtilne količine ali magnetno kvantno število, $-l \leq m \leq l$ in

m_s kvantno število tretje komponente spina ali spinsko magnetno kvantno število, $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

Velikost spina s je vedno enaka $\frac{1}{2}$ in zato se elektroni po spinu ne razlikujejo. Število stanj pri izbranih n in l torej ni enako $2l + 1$, saj pri vsakem m obstajata dve stanji z različnima m_s ; število stanj je torej enako $2(2l + 1)$. Za število stanj pri izbranem n sledi

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} g_{nl} = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2, \quad g_{nl} = 2(2l + 1).$$

Namesto z l označujemo stanja tudi s spektroskopskimi oznakami $s, p, d, f, g, \dots$. Orbitalne so določene s kvantnimi števili n, l in m ; na vsaki orbitali sta lahko dva elektrona, ki se razlikujeta po magnetnem spinskem kvantnem številu.

Energije orbital. Osnovno stanje atoma z vrstnim številom Z konstruiramo tako, da Z elektronov porazdelimo v stanja z najnižjo možno energijo in pri tem upoštevamo izključitveno načelo. Pri $Z = 2$ sta oba elektrona v stanju z $n = 1$ in $l = 0$ ($1s$) in se

⁴Spin pojasnimo šele v okviru relativistične kvantne mehanike.

razlikujeta po spinskem magnetnem kvantnem številu m_s . Pri litijevem atomu tretji elektron ne more biti v stanju z $n = 1$, zato zasede stanje z $n = 2$. Tu ima lahko tirno vrtilno količino z $l = 0$ ali $l = 1$. V vodikovem atomu je energija neodvisna od l , pri atomih z več elektroni pa to ni več res. Stanja z manjšim l imajo nižjo energijo.

Dejstvo, da ima stanje z večjim l višjo energijo (pri enakem n), pojasnimo z naslednjim razmislekom. Elektron čuti privlačno električno polje jedra in odbojno polje elektronov, ki zasedajo orbitale z nižjim n . Efektivno zato čuti manjši naboj in je šibkeje vezan. V stanju z $l = 0$ pa obstaja končna verjetnost, da se elektron povsem približa jedru, v stanjih z $l > 0$ pa to ni mogoče (glej sliki 3 in 4). Ko je elektron v bližini jedra, čuti le naboj jedra in njegova (negativna) potencialna energija je velika. Zaradi tega je elektron v stanju z $l = 0$ močnejše vezan kot v stanju z $l = 1$. Podobno lahko primerjamo stanji z $l = 1$ in $l = 2$ pri $n = 3$. Verjetnost, da se elektron bolj približa jedru, je večja v stanjih z $l = 1$ in manjša v stanjih z $l = 2$ (slika 4). Enako velja za stanja z večjimi l .

Stanja z enakimi n in l tvorijo *podlupino*, ki jo običajno označujemo s spektroskopsko oznako ($1s, 2s, 2p, 3s, \dots$) in se razlikujejo po kvantnih številih m in m_s . Ena ali več podlupin, ki imajo približno enako energijo, pa tvorijo *lupino*⁵ Prvo lupino sestavlja le podlupina $1s$, drugo lupino podlupini $2s$ in $2p$, tretjo $3s$ in $3p$ (glej sliko 11). Podlupina $3d$ je energijsko že toliko višje, da skupaj s podlupinama $4s$ in $4p$ tvori četrto lupino; podobno situacijo imamo pri peti lupini. V šesti lupini se poleg podlupin z $6s, 6p, 5d$ pojavi še podlupina $4f$. Podobno bi veljalo za sedmo lupino, vendar se tu sistem elementov prekine, ker atomska jedra niso več obstojna.

Polnjenje podlupin. S helijem je zapolnjena **prva lupina** ($1s$). V litijevem atomu z $Z = 3$ gre tretji elektron na lupino $2s$. Elektron se nahaja na sorazmerno veliki oddaljenosti od jedra in čuti naboj jedra ($+3e_0$), zmanjšan za naboj dveh elektronov v lupini $1s$, ki sta mnogo bliže jedru. Efektivni naboj, ki ga čuti, je $+e_0$, tolikšen kot v vodikovem atomu. Povprečna oddaljenost od jedra in ionizacijska energija sta zato primerljiva z oddaljenostjo in energijo elektrona v vodikovem atomu v podlupini $2s$, $E_{n=2} = E_1/4 = -3,4$ eV. Izmerjena ionizacijska energija za litijev atom je $-5,4$ eV; razlika gre na račun dejstva, da se elektron v stanju z $l = 0$ z majhno verjetnostjo lahko nahaja v neposredni bližini jedra (glej sliko 3), ko čuti ves naboj jedra. Pri naslednjem elementu, beriliju z $Z = 4$, se četrti elektron pridruži tretjemu na podlupini $2s$. Sistem lahko primerjamo s helijevim atomom, v katerem sta oba elektrona v prvem vzbujenem stanju. Ionizacijska energija je sorazmerno majhna, a večja kot v litijevem atomu, prav tako je velikost atoma sorazmerno velika, a manjša kot litijevem atomu.

Ker je podlupina $2s$ zapolnjena, gre peti elektron v borovem atomu v podlupino $2p$. Pri atomih z $Z = 6, 7, 8, 9, 10$ (C, N, O, F in Ne) se polni podlupina $2p$. Pri neonu je **druga lupina** zapolnjena.

Pri natriju z $Z = 11$ gre zadnji elektron v lupino z $n = 3$ in podlupino $3s$. Čuti efektivni potencial, ki ga povzroča naboj jedra ($+Ze_0$) in $Z - 1$ elektronov na podlupinah z $n = 1$ in 2 . Valovna funkcija je podobna valovni funkciji elektrona v vodikovem atomu z $n = 3$ in $l = 0$: vezavna energija je zato majhna in manjša kot pri litiju, velikost pa

⁵Nekateri avtorji uporabljajo drugačne definicije za pojma lupina in podlupina; tako bi lupino lahko definirali tudi kot skupek stanj z enakim n .

velika. Pri naslednjem atomu, magneziju, elektron zapolni podlupino $3s$. Nato se polni podlupina $3p$, na kateri je lahko 6 elektronov. Zadnji element, argon, ima zapolnjeno podlupino $3p$.

Pričakovali bi, da se sedaj polnijo stanja z $n = 3$ in $l = 2$ (podlupina $3d$), a so ta stanja energijsko precej višje, celo višje kot naslednja podlupina z $n = 4$ in $l = 0$ ($4s$). Predno nadaljujemo, vpeljimo pojem *konfiguracije*.

Konfiguracije. Elektronsko zgradbo ponazorimo s *konfiguracijo*, s katero podamo porazdelitev elektronov po podlupinah. Konfiguracijo litija zapišemo kot $(1s)^2 (2s)^1$ – število elektronov na posamezni podlupini pišemo v eksponentu. Konfiguracijo argona, ki ima zapolnjeno **tretjo lupino**, pa

$$[\text{Ar}] = (1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^6. \quad (2.8)$$

V **četrti lupini** imamo pri prvem elementu kaliju ($Z = 19$) podobno situacijo kot pri litiju in natriju. Prvih 18 elektronov zapolni notranje lupine, zadnji elektron pa gre na podlupino $4s$, ki ima nižjo energijo kot podlupina $3d$. Čuti pozitivni naboj jedra in negativni naboj $Z - 1$ elektronov v notranjih treh lupinah. Valovna funkcija je podobna valovni funkciji elektrona v vodikovem atomu z $n = 4$ in $l = 0$. Pomeni, da je ionizacijska energija manjša, velikost orbitale pa večja kot pri litiju ali natriju. Konfiguracijo poenostavljeno zapišemo kot $[\text{Ar}] (4s)^1$, pri čemer $[\text{Ar}]$ predstavlja konfiguracijo atoma argona, ki smo jo zapisali v (2.8). Pri naslednjem elementu magneziju dvajseti elektron zapolni podlupino $4s$.

Pri naslednjem elementu z $Z = 21$ se začne polniti podlupina $3d$, ki je energijsko nekoliko višje od podlupine $4s$, a nižje od $4p$. Na njej je prostora za $2(2l + 1) = 10$ elektronov. Elementi, ki ustrezajo konfiguracijam od $[\text{Ar}] (4s)^2 (3d)^1$ do $[\text{Ar}] (4s)^2 (3d)^{10}$ segajo od skandija do cinka. Gre za *prehodne elemente*. Pri naslednjih šestih elementih, od galija do kriptonu, se polni $4p$ orbitala. Pri zadnjem je četrta lupina napolnjena in konfiguracijo kriptonu lahko zapišemo

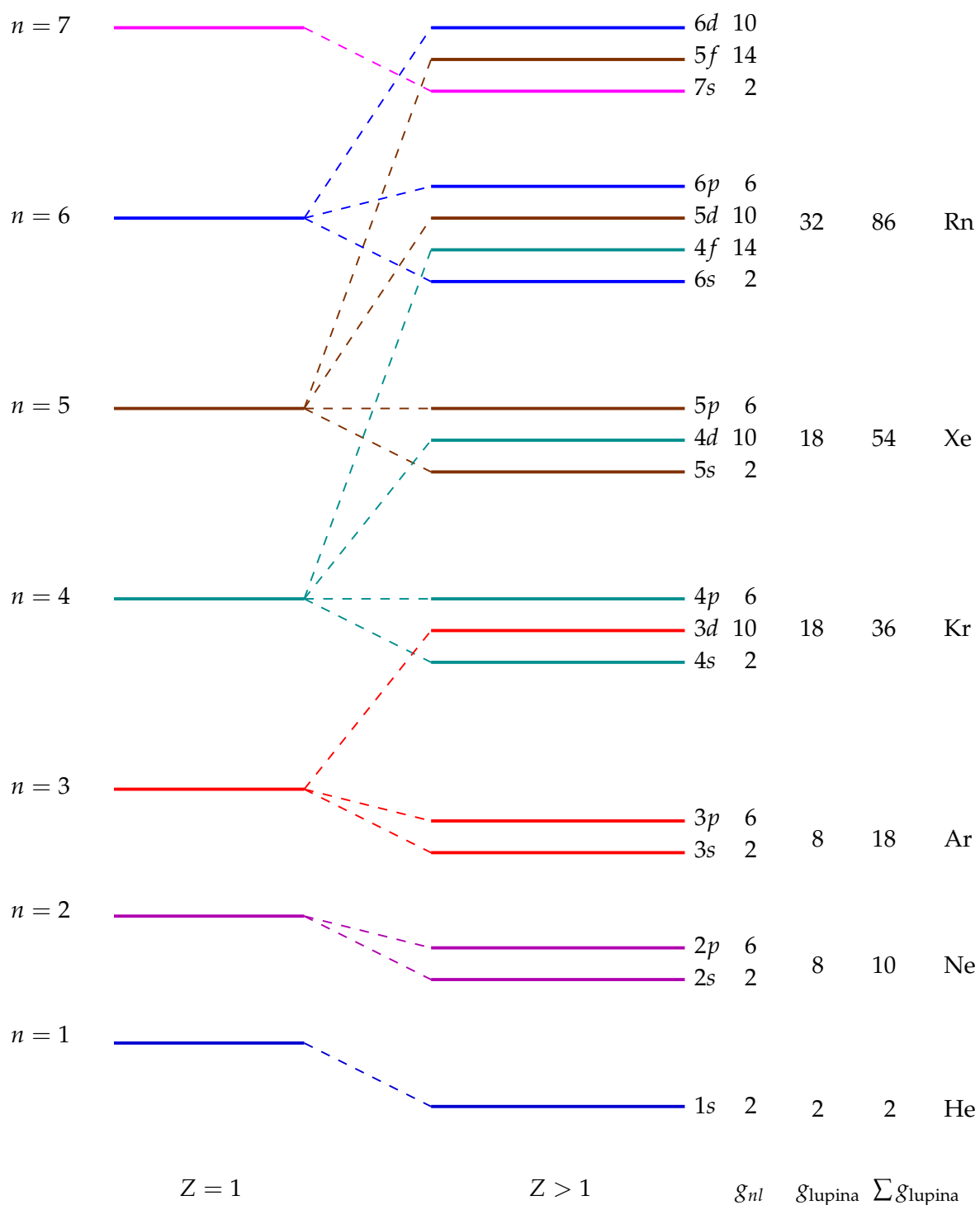
$$[\text{Kr}] = [\text{Ar}] (4s)^2 (3d)^{10} (4p)^6. \quad (2.9)$$

V **peti lupini** je zgradba elementov podobna kot v četrti. Najprej se prične polniti podlupina $5s$, za njo $4d$ in na koncu $5p$. Konfiguracijo zadnjega elementa v tej lupini lahko zapišemo

$$[\text{Xe}] = [\text{Kr}] (5s)^2 (4d)^{10} (5p)^6. \quad (2.10)$$

V **šesti lupini** se pojavi „zaostala“ podlupina $4f$. Energija te podlupine je višja od energije podlupine $6s$ in nekoliko nižja od energije podlupine $5d$. Prvi element je cezij z enim elektronom izven zaključene pete lupine. Ustreza stanju z $n = 6$ in $l = 0$ in ima med vsemi elementi najnižjo ionizacijsko energijo, 3,9 eV in največji polmer. Z barijem se zapolni podlupina $6s$. Nato se prične polniti podlupina $4f$, ki lahko sprejme 14 elektronov, za njo pa podlupina $5d$, ki lahko sprejme 10 elektronov. Elementom, pri katerih se polni podlupina $4f$, pravimo *lantanoidi* ali *redke zemlje*. Na koncu se zapolni še podlupina $5p$. Tu najdemo še zadnji stabilni element, bizmut; zadnji element v tej lupini, radon, pa ni več stabilen – njegovo jedro radioaktivno razpada. Velja

$$[\text{Rn}] = [\text{Xe}] (6s)^2 (4f)^{14} (5d)^{10} (6p)^6. \quad (2.11)$$



Slika 11: Lupine in podlupine: na levi strani ($Z = 1$) je shematsko prikazan vodikov spekter, pri katerem imajo vsa stanja z enakim n enako energijo (energijske razlike niso prikazane sorazmerno; v resnici je razmik med nivoji z manjšim n veliko večji kot pri nivojih z večjim n). Na desni strani je shematsko prikazano zaporedje energijskih nivojev v atomih z več elektroni; stanja z enakim n in l tvorijo podlupino in imajo enako energijo. Število g_{nl} predstavlja največje možno število elektronov na podlupini, g_{lupina} največje možno število števil v lupini, $\sum g_{lupina}$ je kumulativna vsota, na koncu pa je naveden kemijski element, ki ima zapolnjeno lupino.

V **sedmi lupini** ni več stabilnih atomov; vsa jedra so neobstoja in radioaktivno razpadajo. Zgradba elementov je sicer podobna kot v šesti lupini. Zadnji element, ki se pojavlja v naravi, je kalifornij z vrstnim številom 98 in konfiguracijo

$$[\text{Cf}] = [\text{Rn}] (7s)^2 (5f)^{10}. \quad (2.12)$$

Zadnji⁶ znani element z $Z = 116$, livermorij, ne obstaja v naravi, pač pa so ga sintetizirali v laboratoriju. Njegova konfiguracija bi bila videti takole:

$$[\text{Lv}] = [\text{Rn}] (7s)^2 (5f)^{14} (6d)^{10} (7p)^4. \quad (2.13)$$

2.3 Kemijske lastnosti elementov

Periodni sistem. Mendeljejev je že leta 1869 – torej veliko prej, preden so poznali atomsko zgradbo elementov – uredil do takrat znane elemente v tabelo na podlagi njihove mase in kemijskih lastnosti. Elementi, ki imajo podobne kemijske lastnosti, tvorijo *skupino*. Skupine so v tabeli predstavljene s stolpci. Obstaja osem glavnih skupin, ki jih označujemo z rimskimi številkami od I do VIII (slika 12). Med II. in III. skupino je še deset skupin, ki ustrezajo *prehodnim elementom*. Tabela ima sedem vrstic, ki predstavljajo periode.

Tabelo lahko enostavno pojasnimo z elektronskimi konfiguracijam elementov, ki smo jih spoznali v prejšnjem poglavju. Vrstice ustrezajo lupinam, stolpce pa določa število elektronov v zadnji lupini. V I. skupini so elementi, ki imajo en elektron v podlupini ns , (n je glavno kvantno število in tudi zaporedna številka periode. V VIII. skupini so elementi, ki imajo zadnjo lupino zapolnjeno. V II. skupini so elementi, ki imajo v podlupini ns dva elektrona (razen v prvi periodi), v skupinah od III. do VII. pa elementi, ki imajo od enega do sedem elektronov v podlupinah $2p, 3p, \dots 7p$. Od četrte periode dalje se med drugo in tretjo pojavijo prehodni elementi, pri katerih se polnijo podlupine $3d, 4d$ in $5d$. V šesti periodi se pred prehodne elemente vrinejo še *lantanoidi* ali redke zemlje, pri katerih se polni podlupina $4f$, v sedmi periodi pa *aktinoidi* v podlupini $5f$.

Kemijske lastnosti. V najbolj preprosti sliki si spajanje dveh elementov pri kemijski reakciji predstavljamo tako, da eden od elementov elektron (ali dva elektrona) odda in postane pozitivni ion, drugi pa elektron (ali elektrona) sprejme in postane negativni ion. Med pozitivnim in negativnim ionom deluje privlačna sila in elementa se spojita v molekulo ali v kristal. Kot zgled lahko omenimo kuhinjsko sol: natrijev atom odda elektron, ki je v podlupini $3s$ šibko vezan, in postane ion Na^+ , klorov atom pa elektron sprejme in dopolni podlupini $3p$, na kateri mu je manjkal en elektron do polne zasedenosti. Ioni Na^+ in Cl^- se nato razporedijo v kristalno rešetko in tvorijo kristal kuhinjske soli NaCl .

Pri elementih, ki imajo zadnji ali zadnja dva elektrona šibko vezana, je potrebno dovesti malo energije, da pride do ionizacije. Pravimo, da imajo elementi veliko *elektropozitivnost*. Po drugi strani imajo elementi, katerim manjka elektron ali dva do popolnitve zaključene lupine, težnjo, da lupino popolnijo; težnjo kvantitativno izrazimo z *elektronegativnostjo*.

⁶leta 2015

I.		II.		PERIODNI SISTEM ELEMENTOV																		III.	IV.	V.	VI.	VII.	VIII.
1	1,01 H 1 vodik																			4,00 He 2 helij							
	Legenda oznak																										
2	6,94 Li 3 litij	9,01 Be 4 berilij																	10,81 B 5 bor	12,01 C 6 ogljik	14,01 N 7 dušik	16,00 O 8 kisik	19,00 F 9 fluor	20,18 Ne 10 neon			
	1,01 H 1 vodik — relativna atomska masa — simbol — vrstno število — ime elementa																			H — plin Na — trdna snov Hg — tekočina							
3	22,99 Na 11 natrij	24,31 Mg 12 magnezij	Prehodni elementi																26,98 Al 13 aluminij	28,09 Si 14 silicij	30,97 P 15 fosfor	32,07 S 16 žveplo	35,45 Cl 17 klor	39,95 Ar 18 argon			
	39,10 K 19 kalij	40,08 Ca 20 kalcij	44,96 Sc 21 skandij	47,88 Ti 22 titan	50,94 V 23 vanadij	52,00 Cr 24 krom	54,94 Mn 25 mangan	55,85 Fe 26 železo	58,93 Co 27 kobalt	58,69 Ni 28 nikelj	63,55 Cu 29 baker	65,39 Zn 30 cink	69,72 Ga 31 galij	72,61 Ge 32 germanij	74,92 As 33 arzen	78,96 Se 34 selen	79,90 Br 35 brom	83,80 Kr 36 kripton									
5	85,47 Rb 37 rubidij	87,62 Sr 38 stroncij	88,91 Y 39 itrij	91,22 Zr 40 cirkonij	92,91 Nb 41 niobij	95,94 Mo 42 nikelj	(98) Tc 43 tehneć	101,07 Ru 44 rutenij	102,91 Rh 45 rodij	106,42 Pd 46 paladij	107,87 Ag 47 srebro	112,41 Cd 48 kadmij	114,82 In 49 indij	118,71 Sn 50 kositer	121,76 Sb 51 antimon	127,60 Te 52 telur	126,90 I 53 jod	131,29 Xe 54 ksenon									
	132,91 Cs 55 cezij	137,33 Ba 56 barij	138,91 La 57 lantan	178,49 Hf 72 hafnij	180,95 Ta 73 tantal	183,85 W 74 volfram	186,21 Re 75 renij	190,20 Os 76 osmij	192,22 Ir 77 iridij	195,08 Pt 78 platina	196,97 Au 79 zlato	200,59 Hg 80 ž. srebro	204,38 Tl 81 talij	207,20 Pb 82 svinec	208,98 Bi 83 bizmut	(209) Po 84 polonij	(210) At 85 astat	(222) Rn 86 radon									
7	(223) Fr 87 francij	(226) Ra 88 radij	(227) Ac 89 aktinij	(262) Ku 104 kurčatovij	Ha 105 hanij																						
Lantanoidi					140,12 Ce 58 cerij	140,91 Pr 59 prazeodim	144,24 Nd 60 neodim	144,91 Pm 61 prometij	150,36 Sm 62 samarij	151,97 Eu 63 evropij	157,25 Gd 64 gadolinij	158,93 Tb 65 terbij	162,50 Dy 66 disprozij	164,93 Ho 67 holmij	167,26 Er 68 erbij	168,93 Tm 69 tulij	173,04 Yb 70 iterbij	174,97 Lu 71 lutecij									
Aktinoidi					232,04 Th 90 torij	231,04 Pa 91 protaktinij	238,03 U 92 uran	(237) Np 93 neptunij	(244) Pu 94 plutonij	(243) Am 95 americij	(247) Cm 96 kirij	(247) Bk 97 berkelij	(251) Cf 98 kalifornij	(252) Es 99 einsteinij	(257) Fm 100 fermij	(258) Md 101 mendelevij	(259) No 102 nobelij	(262) Lr 103 lavrencij									

Slika 12: Periodni sistem elementov (darkstar.frikz.org)

Veliko elektropozitivnost imajo elementi v prvi in drugi skupini; znotraj skupine elektropozitivnost narašča z naraščajočo periodo, saj so elektroni z večjim n šibkeje vezani. Elementom v prvi in drugi skupini pravilo *alkalijski* elementi. Velika elektro-negativnost je značilna za elemente v šesti in sedmi skupini — govorimo o *halogenih* elementih. V osmi skupini so elementi, ki imajo popolnjene lupine. Elektroni so močno vezani, zato ti elementi zelo težko vstopajo v kemijske reakcije — govorimo o *inertnih* elementih. V naravi se pojavljajo kot *žlahtni plini*.

Pri *prehodnih* elementih v četrti skupini kemijskih lastnosti ne določajo elektroni na podlupini $3d$, pač pa elektroni na podlupini $4s$. Elektroni v stanju z $n = 4$ se v povprečju nahajajo na znatno večji oddaljenosti od jedra kot elektroni v stanju z $n = 3$, zato v kemijskih reakcijah sodelujejo predvsem ti elektroni. Enako velja za prehodne elemente v peti skupini, kjer kemijske lastnosti določata elektrona na podlupini $5s$ in ne elektroni na $4d$. Podobno velja za redke zemlje, kjer kemijskih lastnosti ne določajo elektroni v podlupini $4f$, pač pa elektrona v podlupini $6s$. Na sliki 10 vidimo, da se ionizacijske energije prehodnih elementov in redkih zemelj le malo razlikujejo med seboj.

Elektrone izven zaključenih lupin, ki sodelujejo pri kemijskih reakcijah, imenujemo *valenčni elektroni*.

2.4 Spektri atomov

Vzbujena stanja. Nastanek spektra pri atomih z več elektroni opišemo enako kot pri vodikovem atomu: elektron preide iz osnovnega stanja v vzbujeno stanje in pri prehodu na osnovno stanje ali na nižje ležeča vzbujena stanja izseva foton z energijo, ki je enaka razliki energij med začetnim in končnim stanjem. Veljajo izbirna pravila: prehod je možen, če se kvantno število tirne vrtilne količine spremeni za 1. Vzbujena stanja lahko predstavimo s konfiguracijo. Za zgled zapišimo konfiguracijo magnezija, pri katerem se en elektron vzbudi v stanje $3p$: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^1 (3p)^1$.

Vidno svetlobo dobimo pri prehodih, pri katerih sodelujejo zunanji (valenčni) elektroni. Tu so energijske razlike nekaj eV; velja, da energijski razliki 2,5 eV ustreza ravno valovna dolžina

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{2,5 \text{ eV}} \approx 500 \text{ nm},$$

torej modrozeleno svetlobo.

Rentgenski spektri. Pri prehodih, pri katerih so udeleženi elektroni z notranjih lupin, so energijske razlike precej večje in valovna dolžina izsevane svetlobo pade v ultravijolično in rentgensko območje. Posebej so zanimivi rentgenski spektri z valovnimi dolžinami med približno 10 nm in 0,01 nm in energijami med 100 eV in 100 keV. O nastanku rentgenske svetlobe (žarkov) smo govorili že pri OMF. V rentgenski cevi se elektroni, ki smo jih pospešili z napetostjo nekaj tisoč voltov, ustavljajo v kovinski anodi in pri tem zavorno sevajo. Energijski spekter fotonov se konča pri kinetični energiji elektronov; za mejno valovno dolžino, velja $hc/\lambda_{\min} = e_0U$, pri čemer je U pospeševalna napetost.

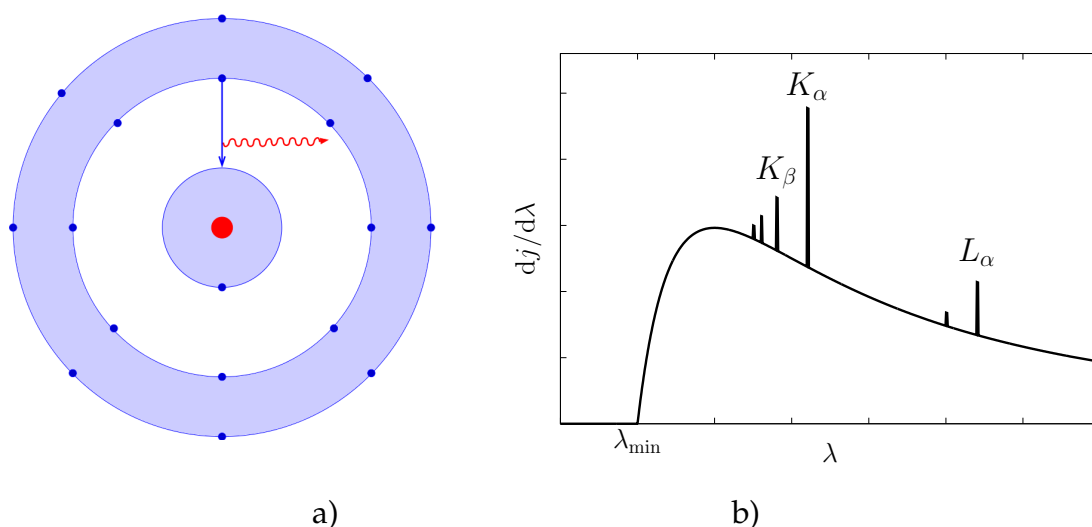
Pospešeni elektroni z dovolj veliko energijo lahko izbijajo elektrone, ki pripadajo notranjim lupinam v atomih, iz katerih je tarča. Na prazno stanje prehajajo elektroni iz podlupin z višjimi energijami in pri tem sevajo rentgensko svetlobo z ostro določeno valovno dolžino. V rentgenskem spektru opazimo značilne črte (slika 13 b). Črte, ki ustrezajo prehodom v najnižjo lupino z $n = 1$, označujemo s črko K ; K_α pomeni prehod iz energijsko najbližje lupine z $n = 2$, K_β iz lupine $n = 3$, ..., oznaka L pomeni prehod v lupino z $n = 2$.

Moseleyev zakon. Posebno zanimiva je črta K_α , ki ustreza prehodu iz stanja z $n = 2$ v osnovno stanje. Elektron čuti le silo, ki jo ustvarjata jedro z nabojem $+Ze_0$ in elektron na orbitali $1s$ z nabojem $-e_0$. Električne sile ostalih elektronov ne čuti, saj ti elektroni ustvarjajo nekakšno votlino (slika 13 a), znotraj katere je njihov prispevek k polju enak 0. K spremembi potencialne energije prispeva le naboj sredice $(Z - 1)e_0$. Spremembo energije izračunamo tako kot v vodikovem atomu, le da pri tem upoštevamo, da je naboj $(Z - 1)$ krat večji:

$$\Delta E = (Z - 1)^2 |E_1| \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{3(Z - 1)^2 |E_1|}{4}, \quad E_1 = -13,6 \text{ eV}.$$

Valovna dolžina črte K_α je potemtakem

$$\lambda_{K_\alpha} = \frac{4hc}{3(Z - 1)^2 |E_1|}.$$



Slika 13: Shematski prikaz nastanka črt v spektru rentgenske svetlobe.

Henry Moseley je enačbo izpeljal že leta 1913 v okviru Bohrovega modela. Moseley je s pomočjo svoje enačbe in izmerjenih spektrov atomov pokazal, da Bohrov model ne velja le za vodikov atom, temveč tudi za druge atome. Enačba je igrala pomembno vlogo tudi pri določanju vrstnega števila elementov Z . Do tedaj so vrstni red elementov v periodnem sistemu določali samo na podlagi mase elementov; sedaj pa je bilo mogoče Z določati neposredno. Na ta način so določili pravilni vrstni red kobalta ($Z = 27$) in niklja ($Z = 28$), saj sta njuni kilomolski masi, 58,9 kg/kmol za kobalt in 58,7 kg/kmol za nikelj, sugerirali obrnjeni vrstni red.

2.5 *Polna vrtilna količina

Polna vrtilna količina elektrona. V prejšnjem poglavju smo spoznali, da ima elektron poleg tirne vrtilne količine tudi lastno vrtilno količino ali spin. Klasična analogija je Zemlja, ki se vrti okoli lastne osi, hkrati pa kroži okoli Sonca. Vrtilna količina je vektor; obe vrtilni količini lahko vektorsko seštejemo v *polno vrtilno količino*. Za polno vrtilno količino veljajo v kvantni mehaniki enake lastnosti kot za tirno vrtilno količino: hkrati je mogoče točno izmeriti le velikost in eno od treh komponent vektorja; običajno izberemo komponento v smeri osi z . Polna vrtilna količina je kvantizirana; velikost določa kvantno število polne vrtilne količine, ki ga bomo označili z j , velikost tretje komponente pa magnetno kvantno število m_j . Če z $\vec{J}$ označimo polno vrtilno količino, lahko zapišemo:

$$\langle \vec{J}^2 \rangle = \hbar^2 j(j+1) \quad \text{in} \quad \langle J_z \rangle = \hbar m_j.$$

Katere vrednosti lahko zavzameta kvantni števili j in m_j ? Ker se komponente seštevajo kot skalarji, velja

$$m_j = m_l + m_s,$$

pri čemer smo magnetno kvantno število tirne vrtilne količine označili z m_l . Določitev kvantnega števila velikosti j pa ni tako enostavna: za zgled si pogledjmo primer, ko je

$l = 1$ in $m_l = -1, 0, 1$. V tem primeru lahko tvorimo naslednje vsote m_l in m_s , $m_s = \pm \frac{1}{2}$:

$$1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}, \quad 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}, \quad 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}, \quad 0 - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}, \quad -1 + \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}, \quad -1 - \frac{1}{2} = -\frac{3}{2}.$$

Največja vsota ustreza $j = \frac{3}{2}$. Tej vrednosti pripadajo $2j + 1 = 2 \cdot \frac{3}{2} + 1 = 4$ stanja z različnimi m_j ; poleg $\frac{3}{2}$ še $\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$ in $-\frac{3}{2}$. Od stanj, ki smo jih tvorili s kombinacijo m_l in m_s , sta ostali še dve stanji z $m_j = \frac{1}{2}$ in $m_j = -\frac{1}{2}$. Tema stanjema priredimo kvantno število $j = \frac{1}{2}$. V našem primeru torej ugotovimo, da lahko tirno vrtilno količino z $l = 1$ in spin sklopimo v *dve* različni polni vrtilni količini s kvantnima številoma $j = \frac{3}{2}$ in $j = \frac{1}{2}$. Na podoben način lahko seštejemo tirno vrtilno količino z $l = 2$ in spin $s = \frac{1}{2}$ – skupaj je to $2(2 \cdot 2 + 1) = 10$ stanj – v polno vrtilno količino z $j = \frac{3}{2}$ in $j = \frac{5}{2}$. Število stanj pri $j = \frac{3}{2}$ je $2 \cdot \frac{3}{2} + 1 = 4$, pri $j = \frac{5}{2}$ pa $2 \cdot \frac{5}{2} + 1 = 6$, skupaj torej tudi 10 stanj. Opisanemu postopku seštevanja pravimo tudi *sklapanje vrtilnih količin*.

Fina struktura spektralnih črt. Polno vrtilno količino lahko eksperimentalno zaznamo pri finem razcepu spektralnih črt, do katerega pride po vplivom *magnetnega polja jedra*.

Klasično elektron kroži okoli protona; če se postavimo v sistem elektrona, pa proton kroži okoli elektrona. Gibajoči se naboj predstavlja električni tok $I = e_0 v$, pri čemer je v frekvenca (navideznega) kroženja protona okoli elektrona. Električni tok v zanki ustvarja magnetno polje. Polje v središču tokovne zanke izpeljemo iz Biot-Savartovega zakona; dobimo $B = \mu_0 I / 2r$, pri čemer je r razdalja med protonom in elektronom. Dobimo:

$$B = \frac{\mu_0 e_0 v}{2r} = \frac{\mu_0 e_0}{4\pi r} \omega.$$

Smer magnetnega polja ima smer osi zanke, torej smer kotne hitrosti kroženja $\vec{\omega}$. Kotna hitrost (navideznega) kroženja protona okoli elektrona je enaka kotni hitrosti kroženja elektrona okoli protona. Kotno hitrost elektrona lahko izrazimo z vrtilno količino $\vec{L}$ in vztrajnostnim momentom elektrona $J = m_e r^2$. Za magnetno polje jedra na mestu elektrona dobimo

$$\vec{B} = \frac{\mu_0 e_0}{4\pi r} \frac{\vec{L}}{m_e r^2}.$$

Zaradi elektronove notranje vrtilne količine (spina), $\vec{S}$, ima elektron dodatno magnetno energijo, ki smo jo spoznali pri Zeemanovem pojavu, $W_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Magnetni moment je premo sorazmeren z vrtilno količino, v našem primeru z spinom, $\mu = -2e_0 \vec{S} / 2m_e$. Dodatni faktor 2 je mogoče izpeljati v okviru relativistične izpeljave, predznak $-$ je posledica negativnega naboja. Magnetna energija je potem enaka

$$W_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{\mu_0 e_0^2}{4\pi m_e^2 r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}.$$

V kvantnomehanski obravnavi pridemo do enakega rezultata; pričakovana vrednost magnetne energije je odvisna od pričakovane vrednosti *skalarnega produkta* tirne in spinske vrtilne količine. Za izračun pričakovane vrednosti produkta si pomagamo z naslednjim računskim trikom: enačbo za polno vrtilno količino, $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, kvadriramo in dobimo

$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}.$$

Od tod izrazimo pričakovano vrednost skalarnega produkta $\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle$ in upoštevamo $\langle \vec{J}^2 \rangle = \hbar^2 j(j+1)$, $\langle \vec{L}^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1)$ in $\langle \vec{S}^2 \rangle = \hbar^2 s(s+1) = \frac{3}{4} \hbar^2$:

$$\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle \vec{J}^2 \rangle - \langle \vec{L}^2 \rangle - \langle \vec{S}^2 \rangle \right) = \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right)$$

in končno

$$W_m = \frac{\mu_0 e_0^2}{4\pi m_e^2 r^3} \langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle = \frac{\mu_0 e_0^2 \hbar^2}{8\pi m_e^2 r^3} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right).$$

V stanjih z $l = 0$ je $j = s = \frac{1}{2}$ in magnetna energija je enaka 0; v stanjih z $l = 1$ sta možni dve vrednosti za j , za $j = \frac{3}{2}$ je izraz v oklepaju enak $\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4} = 1$, za $j = \frac{1}{2}$ pa -2 . Stanje z $j = \frac{3}{2}$ ima torej višjo energijo kot stanje z $j = \frac{1}{2}$, kar pomeni, da je energijski nivo z $l = 1$ razcepljen v dva nivoja. Energijski razmik med nivojema je velikostnega reda 10^{-5} eV, kar je veliko manj od energijskih razlik med različnimi glavnimi kvantnimi števili n . Posledica je razcep črte pri prehodu iz stanj z $l = 1$ na osnovno stanje; v natančnejših spektroskopih lahko opazimo razcep črte v dve črti.

Podobno velja za razcep črt pri prehodih med $l+1$ in l za $l \geq 1$; pojavu pravimo *fini razcep* spektralnih črt.

Polna vrtilna količina pri atomih z več elektroni. Razcep spektralnih črt, ki smo ga opisali v prejšnjem razdelku, je veliko bolj izrazit pri atomih z več elektroni. Energijo stanja določa poleg glavnega in tirnega kvantnega števila tudi kvantno število polne vrtilne količine.

Skupna vrtilna količina elektronov v atomu je (vektorska) vsota vrtilnih količin posameznih elektronov, kar velja tako za tirno kot spinsko in polno vrtilno količino. Formalno zapišemo:

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^Z \vec{L}_i, \quad \vec{S} = \sum_{i=1}^Z \vec{S}_i, \quad \vec{J} = \sum_{i=1}^Z \vec{J}_i,$$

pri čemer so $\vec{L}_i$, $\vec{S}_i$ in $\vec{J}_i$ tirna, spinska in polna vrtilna količina posameznega elektrona. Skupni tirni vrtilni količini pripišemo kvantno število L , $L = 0, 1, 2, \dots$, skupni spinski vrtilni količini kvantno število S , $S = 0, 1, 2, \dots$ v primeru sodega števila elektronov in $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ v primeru lihega števila elektronov; enako kot za S velja za kvantno število polne vrtilne količine J . Iz trikotniške neenakosti (glej sliko 14) sledi

$$|L - S| \leq J \leq L + S.$$

Računanje vrtilnih količin se poenostavi, če upoštevamo da je skupna tirna vrtilna količina in spinska vrtilna količina elektronov v zaključeni lupini enaka 0. Žlahtni atomi imajo v osnovnem stanju $\vec{L} = \vec{S} = \vec{J} = 0$. Vrtilne količine torej določajo le elektroni zunaj zaključene lupine: v prvi skupini je to en sam elektron, v drugi skupini dva elektrona...



Slika 14: Vrtilne količine se seštevajo vektorsko; pri tem kvantno število polne vrtilne količine lahko zavzame le nenegativna cela števila (v primeru sodega števila elektronov), ali lihe večkratnike $\frac{1}{2}$ (v primeru lihega števila elektronov).

Spektroskopske oznake. Pri vodikovem atomu smo spoznali, da je zaradi prisotnosti notranjega magnetnega polja v atomu energija elektrona odvisna tudi od polne in tirne vrtilne količine. Pri atomih z več elektroni je ta odvisnost bolj izrazita; poleg polne in tirne vrtilne količine je pri stanjih z dvema ali več elektroni pomemben tudi skupni spin. Energija prehoda in s tem valovna dolžina črte je odvisna od vseh treh vrtilnih količin v začetnem in končnem stanju. V spektroskopiji stanje atoma označimo s simbolom, ki ima obliko

$$^{2S+1}L_J,$$

pri čemer namesto številske vrednosti za L pišemo ustrezno spektroskopsko oznako in sicer S za $L = 0$, P za $L = 1$, D za $L = 2$, Primer:

$$^2P_{\frac{3}{2}} : S = \frac{1}{2}, L = 1, J = \frac{3}{2}; \quad ^3D_2 : S = 1, L = 2, J = 2; \quad ^1F_3 : S = 0, L = 3, J = 3.$$

Ortohelij in parahelij. Oglejmo si možna stanja dveh elektronov v atomu helija na nivojih z $n = 1$ in $n = 2$. Skupni spin ustreza $S = 0$ ali $S = 1$. V primeru $S = 0$ sta oba spina nasprotno usmerjena (antiparalelna). Govorimo o *paraheliju*. V primeru $S = 1$ govorimo o *ortoheliju*.

Ko sta oba elektrona v osnovnem stanju z $n = 1$ in $l = 0$, sta zaradi izključitvenega načela lahko le antiparalelna. Velja $S = 0$, $L = 0$ in $J = 0$; oznaka stanja je 1S_0 .

Ko eden od elektronov preide v stanje z $n = 2$ in $l = 0$ ali $l = 1$, sta možni obe vrednosti $S = 0$ in $S = 1$; možni kvantni števili skupne tirne vrtilne količine pa sta prav tako 0 ali 1. V primeru parahelija, $S = 0$, je $J = L$ in možni spektroskopski oznaki sta 1S_0 in 1P_1 . V primeru $S = 1$ so možne oznake 3S_1 ter $^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$.

Ko sta oba elektrona v stanju z $n = 2$, je lahko $L = 0, 1$ ali 2 , v kombinaciji z $S = 0$ ali 1 dobimo naslednje oznake:

$$\text{parahelij: } S = 0, J = L : ^1S_0, ^1P_1, ^1D_2,$$

$$\text{ortohelij: } S = 1, L = 0 : ^3S_1,$$

$$L = 1 : ^3P_0, ^3P_1, ^3P_2,$$

$$L = 2 : ^3D_1, ^3D_2, ^3D_3.$$

3 Molekule

3.1 Vezi med atomi

V naravi skoraj ne najdemo prostih atomov razen v primeru žlahtnih plinov. Večina snovi je v obliki spojin. Atome vežejo v spojine medatomske vezi; najpomembnejši sta *ionska* in *kovalentna* vez.

Ionska vez. Pri ionski vezi eden od atomov odda enega ali dva elektrona in nastane pozitiven ion; drugi atom elektron ali elektrona sprejme in postane negativen ion. Različno predznačena iona se privlačita z elektrostatsko silo in tvorita vezan sistem. Atom, ki elektron odda, običajno pripada prvi skupini v periodnem sistemu, pri katerih je zunanji elektron šibko vezan; oddani elektron sprejme atom iz sedme skupine, ki tako zapolni zadnjo nezapolnjeno lupino. Značilen primer sta natrij iz prve skupine in klor iz sedme skupine. Natrijevi in klorovi ioni se razporedijo v kubično rešetko — kristal kuhinjske soli. Podobno si par elektronov izmenjata atom iz druge in atom iz šeste skupine.

Kovalentna vez. V naravi srečamo veliko primerov vezanih sistemov, v katerih so atomi iste vrste: molekule kisika O_2 in dušika N_2 v zraku, kristalna struktura kovin, ki jo tvorijo le atomi ene vrste. V teh primerih si dva ali več atomov delijo valenčne elektrone. Valenčni elektroni deluje kot nekakšno „lepilo“, ki veže atome.

Kovalentna vez v molekuli H_2^+ . Najpreprostejši vezan sistem, na katerem lahko pojasnimo mehanizem kovalentne vezi, je enkrat ionizirana molekula vodika H_2^+ . Sestavljata jo dva protona in elektron. Sistem treh delcev ima energijo enako 0, ko so vsi trije delci na velikih medsebojnih oddaljenostih. Ko sta protona še precej oddaljena in je elektron vezan z enim od protonov v atom vodika, je energija sistema enaka vezavni energiji vodikovega atoma.

Razmislimo, kako se spreminja energija sistema, če se razdalja med protonoma zmanjšuje. Z določeno verjetnostjo se elektron lahko nahaja tudi pri drugem protonu; verjetnost z zmanjševanjem razdalje narašča. Ko sta protona skupaj, se obnašata kot eno samo atomsko jedro z dvojnim osnovnim nabojem. Elektron čuti enak naboj kot v enkrat ioniziranemu helijevemu atomu. Za tak sistem smo v razdelku *Helijev atom* ugotovili, da je njegova energija v osnovnem stanju štiri krat večja kot energija osnovnega stanja vodikovega atoma. Za energijo elektrona torej velja:

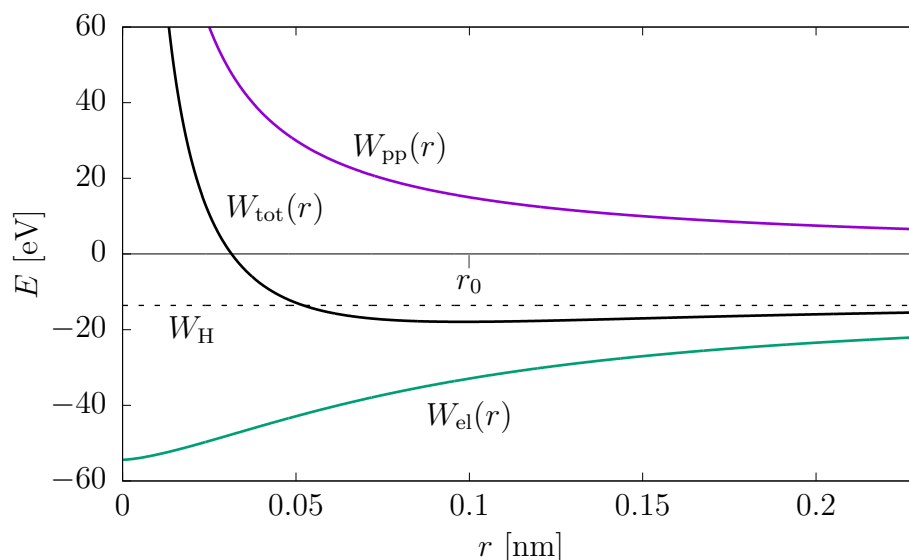
$$W_{el}(r) = E_1 = -13,6 \text{ eV}, \quad r \rightarrow \infty \quad \text{in} \quad W_{el}(r) = 4E_1 = -54,4 \text{ eV}, \quad r = 0.$$

K skupni energiji sistema treh delcev moramo šteti še odbojno energijo med protonoma, ki je enaka kar $W_{pp}(r) = e_0^2/4\pi\epsilon_0 r$. Obe energiji kot funkciji razdalje med protonoma kaže slika 15. Elektronski oblak „vleče“ sistem skupaj, elektrostatska sila med protonoma pa narazen. Sistem je v ravnovesju, ko je skupna energija W_{tot} najmanjša; v našem primeru je to pri vrednosti r_0 , prikazani na sliki. Pri večjih razdaljah ($r > r_0$) prevladuje privlačna sila elektronskega oblaka, pri manjših pa odboj.

V primeru obravnavane molekule je $r_0 \approx 0,1$ nm. Vezavno energijo definiramo kot energijo, potrebno, da sistem razbijemo na nevtralni vodik in proton na veliki razdalji:

$$W_{\text{vez}} = W_{\text{tot}}(r_0) - W_{\text{tot}}(r \rightarrow \infty) = W_{\text{tot}}(r_0) - W_{\text{H}}$$

in meri $-2,65$ eV.



Slika 15: Energija ionizirane molekule H_2^+ kot funkcija razdalje med jedroma.

Molekula H_2 . Enak mehanizem pojasni vez v nevtralni molekuli H_2 , v kateri za vezavo poskrbita oba elektrona. Asimptotsko stanje sistema tvorita dva nevtralna atoma vodika na veliki razdalji. Energija sistema je v tem primeru enaka dvakratni energiji vodikovega atoma. V drugem skrajnjem primeru, ko bi bila razdalja med protonoma enaka 0, bi imeli s stališča elektronov enako situacijo kot v primeru helijevega atoma. Vezavna energija obeh elektronov bi bila enaka vezavni energiji elektronov v atomu helija. V primeru molekule H_2 lahko zapišemo:

$$W_{\text{el}}(r) = 2E_1 = -27,2 \text{ eV}, \quad r \rightarrow \infty \quad \text{in} \quad W_{\text{el}}(r) = W_{\text{He}} = -79,0 \text{ eV}, \quad r = 0.$$

Za krajevno odvisnost energije elektronskega oblaka in odbojne energije med protonoma dobimo podobno sliko kot v primeru molekule H_2^+ , le da je sedaj vezavna energija elektronov močnejša. Zaradi tega je tudi ravnovesna razdalja manjša, $r_0 = 0,074$ nm, vezavna energija

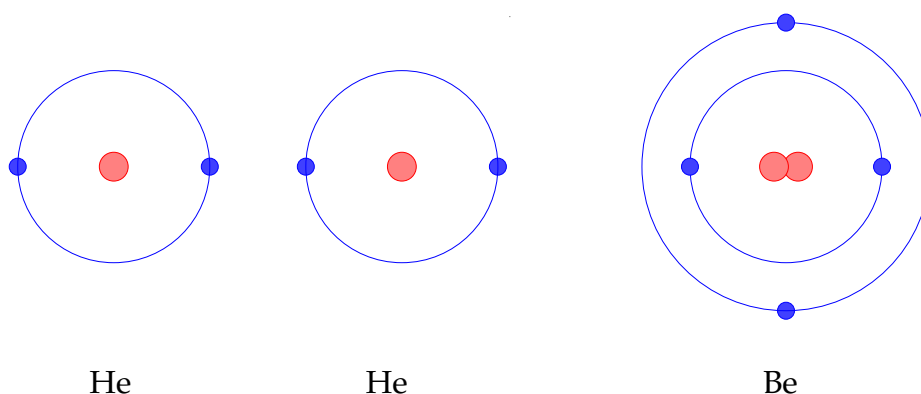
$$W_{\text{vez}} = W_{\text{tot}}(r_0) - W_{\text{tot}}(r \rightarrow \infty) = W_{\text{tot}}(r_0) - 2W_{\text{H}}$$

pa večja, $W_{\text{vez}} = -4,5$ eV.

Enak mehanizem velja za druge molekule, v katerih nastopajo atomi istega elementa, na primer O_2 , N_2 .

Pri molekulah, ki jih tvorijo različni atomi, sta v splošnem hkrati prisotni obe vrsti vezi, ionska in kovalentna.

Kovalentna vez in žlahtni plini. Zakaj mehanizem kovalentne vezi ne deluje v primeru žlahtnih plinov? Oglejmo si primer dveh helijevih atomov v osnovnem stanju. Ko sta helijeva atoma na večji medsebojni razdalji, sta elektrona v vsakem atomu v stanju $1s$. Ko se jedri povsem približata — to bi ustrezalo atomu berilija, ki ima v jedru štiri protone –, pa vsi štirje elektroni zaradi izključitvenega načela ne morejo biti v istem stanju. Dva elektrona morata preiti v stanje $2s$, kar pomeni, da sta šibkeje vezana (slika 16). Prispevek vezavne energije elektronov k skupni energiji je zato manjši in ne more uravnovesiti odbojne energije med jedroma. Skupna energija, kot funkcija razdalje med jedroma, $W_{\text{tot}}(r)$, nima minimuma pri končni vrednosti r v nasprotju s skupno energijo v primeru molekule vodika na sliki 15. Ravnoesno stanje dveh vezanih atomov helija ne obstaja.



Slika 16: Elektronska struktura v atomih helija in v berilijevem atomu.

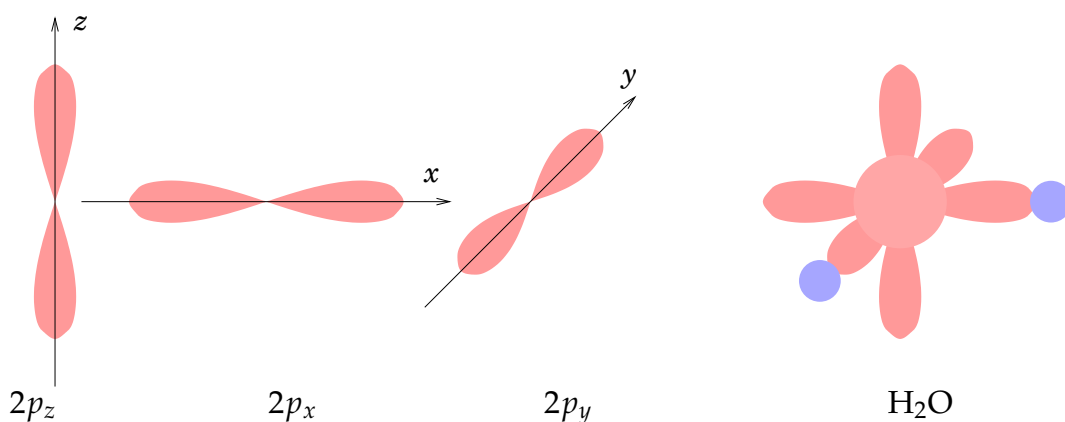
Podoben argument velja tudi za druge žlahtne pline.

Kompleksne molekule. Pri atomih z večjim vrstnim številom velja, da pri kovalentni vezi sodelujejo le valenčni elektroni. Njihove orbitale se bistveno spremenijo, medtem ko ostanejo notranje orbitale skoraj nespremenjene. Zanimiv primer je molekula vode, H_2O , pri kateri se valenčne orbitale kisika bistveno spremenijo. Konfiguracijo kisika zapišemo kot $1s^2, 2s^2, 2p^4$. Brez izgube splošnosti lahko privzamemo, da sta dva valenčna elektrona v podlupini $2p$ v stanju z $m = 0$ in po eden v stanju z $m = 1$ in $m = -1$. Pri spajanju z drugimi atomi se stanji z $m = \pm 1$ (glej tabelo 1) spremenita in sicer se sestavita v dve stanji, ki nimata več točne tretje komponente vrtilne količine, imata pa določeno orientacijo v ravnini (x, y) :

$$\begin{aligned}\psi_{2p_x} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [R_{2,1}(r)Y_{11}(\vartheta, \varphi) + R_{2,1}(r)Y_{1-1}(\vartheta, \varphi)] = \sqrt{\frac{3}{16\pi}} R_{2,1}(r) \sin \vartheta [e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}] \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{2,1}(r) \sin \vartheta \cos \varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{2,1}(r) \frac{x}{r}, \\ \psi_{2p_y} &= \frac{1}{\sqrt{2}i} [R_{2,1}(r)Y_{11}(\vartheta, \varphi) - R_{2,1}(r)Y_{1-1}(\vartheta, \varphi)] = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{2,1}(r) \frac{y}{r}.\end{aligned}$$

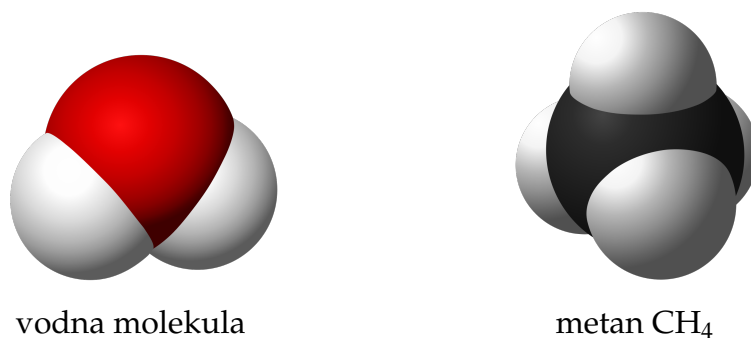
Valovni funkciji imata enako obliko kot valovna funkcija z $m = 0$, le da je ψ_{2p_x} usmerjena vzdolž koordinatne osi x in ne z , ψ_{2p_y} pa vzdolž osi y (glej sliko). Elektron, ki ga

prispeva vodik v skupno vez, gre lahko v orbitalo $2p_x$ ali $2p_y$, ne pa orbitalo z $m = 0$, saj je ta že zasedena z dvema elektronoma. Drugi vodik prispeva elektron v orbitalo $2p_x$ ali $2p_y$, ki je ostala še nezasedena. En vodik se tako nahaja na osi x , drugi pa na osi y . V tako poenostavljeni sliki tvorita jedri vodika z jedrom kisika pravi kot. Zaradi odbojne sile med jedroma vodika, se kot poveča in naraste na $104,5^\circ$. Vodna molekula ima posledično nesimetrično zgradbo. Težišče negativnega naboja (elektronov) ne sovpa s težiščem pozitivnega naboja (jeder), ki je pomaknjen bližje vodikovima atomoma. Rezultat je močan električni dipolni moment. Voda je zato pri normalnih pogojih v obliki tekočine (kapljevine) in ne plina, ima veliko dielektričnost in površinsko napetost. Zaradi nesimetrične oblike kristalizira v nenavadnih oblikah kristalov, močno odvisnih od zunanjih pogojev, pri katerih se dogodi fazni prehod.



Slika 17: Modificirane orbitale v podlupini $2p$: $2p_z$ je orbitala z $m = 0$, $2p_x$ in $2p_z$ pa sta linearni kombinaciji orbital z $m = 1$ in $m = -1$. V molekuli vode se vodikova atoma vežeta na orbitali, na katerih je po en valenčni elektron kisika. Krog v središču kisika ponazarja elektronski oblak v podlupinah $1s$ in $2s$, ki pri vezi ne sodeluje.

Zanimive so spojine z ogljikom. Pri vezeh drugih elementov z ogljikom sodelujejo štirje valenčni elektroni: dva iz podlupine $2s$ in dva iz podlupine $2p$. Pri nekaterih spojinah se vse štiri orbitale preoblikujejo v tako imenovane *hibridne* orbitale, ki segajo iz središča atoma do oglišč tetraedra. Molekula metana CH_4 ima tako obliko tetraedra s štirimi vodikovimi atomi v ogliščih in atomom ogljika v središču.



Slika 18: Model vodne molekule in metana. <https://en.wikipedia.org/wiki/Methane#/>
https://en.wikipedia.org/wiki/Properties_of_water#/

3.2 Rotacijska vzbujena stanja.

Ločimo elektronska, rotacijska in vibracijska vzbujena stanja.

Energije vzbujenih stanj Molekula se lahko vrti okoli svojega težišča; energijski spekter kvantnega rotatorja smo zapisali kot

$$E_L = \frac{\langle \vec{I}^2 \rangle}{2J} = \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2J}, \quad L = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

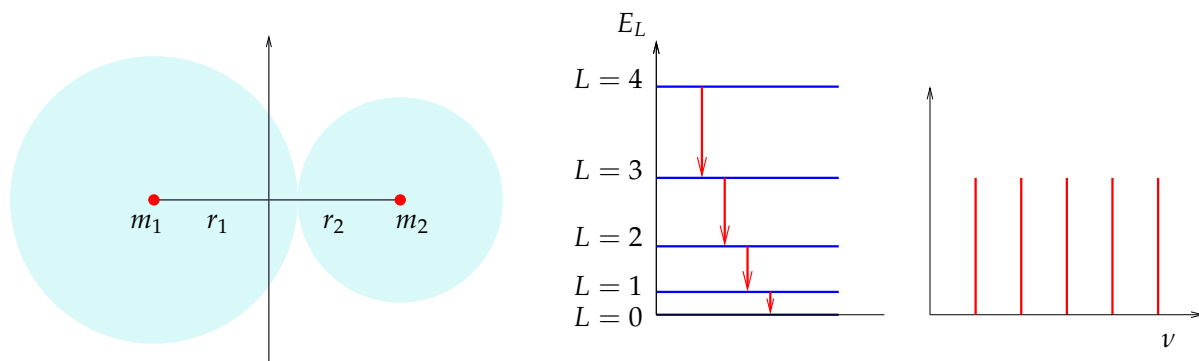
L je kvantno število vrtilne količine. Dvoatomna molekula se vrti okoli težiščne osi, ki je pravokotna na zveznico med jedroma. Jedro je mnogo težje od elektronov, zato k vztrajnostnemu momentu prispevata le jedra, ki ju lahko obravnavamo kot točkasti telesi. Vztrajnostni moment zapišemo kot

$$J = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2, \quad r_1 = \frac{m_2 r}{m_1 + m_2}, \quad r_2 = \frac{m_1 r}{m_1 + m_2}, \quad r = r_1 + r_2,$$

pri čemer je r razdalja med jedroma, r_1 in r_2 pa oddaljenosti prvega jedra z maso m_1 od osi in enako r_2 za drugo jedro (glej sliko 19). Dobimo

$$J = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r^2 = m^* r^2, \quad m^* = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Tu je m^* reducirana masa molekule.



Slika 19: Shema rotacije dvoatomne molekule, rotacijski nivoji in frekvenčni spekter.

Rotacijski spekter. Pri prehodu z višjega na nižje rotacijsko stanje molekula seva. Velja izbirno pravilo $\Delta L = \pm 1$; molekula lahko prehaja le na sosednje vzbujeno stanje. Za energijski razmik med zaporednima stanjema dobimo

$$\Delta E_L = E_{L+1} - E_L = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 2m^* r^2} [(L+1)(L+2) - L(L+1)] = \frac{\hbar^2 (L+1)}{4\pi^2 m^* r^2}.$$

in za frekvenco izsevane svetlobe

$$\nu_L = \frac{\Delta E_L}{h} = \frac{\hbar (L+1)}{4\pi^2 m^* r^2} = \nu_0 (L+1), \quad \nu_0 = \frac{h}{4\pi^2 m^* r^2}.$$

Frekvence so kar večkratniki osnovne frekvence ν_0 . V frekvenčnem spektru dobimo enakomerno razmaknjene črte, kot kaže desni graf na sliki 19. Osnovni frekvenci ustreza valovna dolžina

$$\lambda_{\text{maks}} = \frac{c}{\nu_0} = \frac{4\pi^2 m^* c r^2}{h}.$$

Izračunajmo največjo valovno dolžino za molekulo ogljikovega monoksida CO. Ravnovesna razdalja meri 0,113 nm, masa ogljika je $2,0 \cdot 10^{-26}$ kg, kisika pa $2,66 \cdot 10^{-26}$ kg. Reducirana masa sistema je $m^* = m_O m_C / (m_O + m_C) = 1,14 \cdot 10^{-26}$ kg. Za $L = 0$ dobimo

$$\Delta E_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m^* r^2} = 4,76 \cdot 10^{-4} \text{ eV}, \quad \lambda_{\text{maks}} = \frac{hc}{\Delta E_0} = 2,6 \text{ mm}.$$

Značilne valovne dolžine v rotacijskem spektru padejo v mejno področje med *mikrovalovi* in *dolgovalovno infrardečo svetlobo*.

Vibracijska vzbujena stanja. Pri obravnavi kovalentne vezi smo ugotovili, da je ravnovesna razdalja med jedroma v dvoatomni molekuli v minimumu potenciala, ki ga sestavljata odbojni potencial med jedroma in privlačni potencial elektronskega oblaka. Ravnovesna lega je stabilna: če molekulo malo stisnemo, naraste odbojna sila hitreje, kot se po velikosti spremeni privlačna sila in rezultanta kaže proti ravnovesni legi. Če razdaljo povečamo, deluje sila v nasprotni smeri, a prav tako proti ravnovesni legi. Klasična analogija je delec na vzmeti. Če delec izmaknemo iz ravnovesne lege, zaniha. Kvantno mehansko sistem opišemo kot gibanje delca v harmonskem potencialu, $V(r) = \frac{1}{2} k(r - r_0)^2$, pri čemer je $r - r_0$ odmik od ravnovesne lege. Za energijski spekter velja

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

pri čemer je ω klasična krožna frekvenca nihanja sistema.

V primeru dvoatomne molekule imamo pravzaprav opravka z dvema delcema, med katerima je elastična vzmet. Za tak sistem smo pri *Matematičnih metodah v fiziki II* ugotovili, da ima poleg ničelne frekvence še eno netrivialno rešitev, pri kateri telesi nihata drugo proti drugemu s frekvenco

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m^*}}, \quad m^* = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Tu je m^* reducirana masa sistema, enaka kot pri rotaciji molekule. Konstanta k je elastična konstanta vzmeti in jo lahko povežemo s potencialno energijo W_{tot} med atoma v molekuli z naslednjim razmislekom: $W_{\text{tot}}(r)$ razvijmo v Taylorjevo vrsto okoli ravnovesne razdalje r_0 :

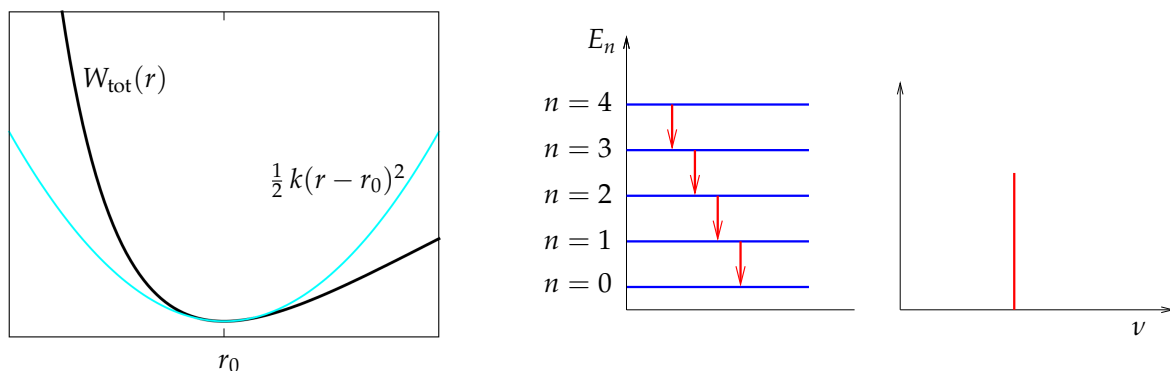
$$\begin{aligned} W_{\text{tot}}(r) = & W_{\text{tot}}(r_0) + \left. \frac{dW_{\text{tot}}(r)}{dr} \right|_{r=r_0} (r - r_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 W_{\text{tot}}(r)}{dr^2} \right|_{r=r_0} (r - r_0)^2 \\ & + \frac{1}{6} \left. \frac{d^3 W_{\text{tot}}(r)}{dr^3} \right|_{r=r_0} (r - r_0)^3 + \dots \end{aligned}$$

Prvi odvod potencialne energije je enak nič v ravnovesni legi, saj je tu minimum energije, drugi odvod je pozitiven, člen s tretjim odvodom pa lahko zanemarimo, če so

odmiki od ravnovesne lege dovolj majhni. V tem primeru ostaneta le prvi in tretji člen:

$$W_{\text{tot}}(r) = W_{\text{tot}}(r_0) + \frac{1}{2}k(r - r_0)^2, \quad k = \left. \frac{d^2 W_{\text{tot}}(r)}{dr^2} \right|_{r=r_0}.$$

Elastična konstanta, ki se pojavi v izrazu za frekvenco, je enaka drugemu odvodu potencialne energije v ravnovesni legi. Na sliki 20 je prikazan realen potencial in parabolični približek potenciala, ki se v okolici ravnovesne lege lepo prilega realnemu.



Slika 20: Slika na levi: potencial med atomoma v molekuli aproksimiramo s parabolo $\frac{1}{2}k(r - r_0)^2$, ki se za majhne odmike dobro prilega potencialu; slika na desni: energijski spekter v paraboličnem potencialu in spekter izsevane infrardeče svetlobe.

Vibracijski spekter dvoatomnih molekul. Izbirno pravilo je $\Delta n = \pm 1$, kar pomeni, da so možni le prehodi med sosednjimi stanji. Ker so energije stanj enakomerno razmaknjene, imajo vsi izsevani fotoni enako frekvenco, ki je enaka kar *klasični* frekvenci, s katero niha molekula:

$$\nu = \frac{E_{n+1} - E_n}{h} = \frac{\hbar\omega}{h} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m^*}}$$

(glej sliko 20). Valovna dolžina je enaka

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = 2\pi c \sqrt{\frac{m^*}{k}}.$$

Konstante k ne moremo določiti iz prvih principov, pač pa jo lahko določimo iz znane m^* in izmerjene frekvence. Iz odstopanj od idealnega spektra, v katerem je zastopana ena sama frekvenca, lahko sklepamo na jakost višjih členov v Taylorjevem razvoju in od tod na obliko potenciala pri nekoliko večjih odmikih od ravnovesne lege.

Izmerjene frekvence padejo v *infrardeče* območje; to so valovne dolžine nekaj mikrometrov.

Toplogredni pojav. Z vibracijskim spektrom molekul je povezan *toplogredni pojav*. Zemeljsko površje seva kot črno telo; pri temperaturi okoli 300 K ima Planckova porazdelitev vrh pri 10 μm , to je ravno območju valovnih dolžin, ki jih sevajo dvoatomne

pa tudi tri in več atomne molekule. Pri teh valovnih dolžinah molekule plinov tudi močno absorbirajo svetlobo, ki jo oddaja zemeljsko površje. Molekule absorbirano infrardečo svetlobo sevajo v okolico; en del gre v vesolje, drugi del pa se vrne nazaj na nazaj na Zemljo in dodatno prispeva k segrevanju zemeljskega površja.

3.3 Elektronska vzbujena stanja.

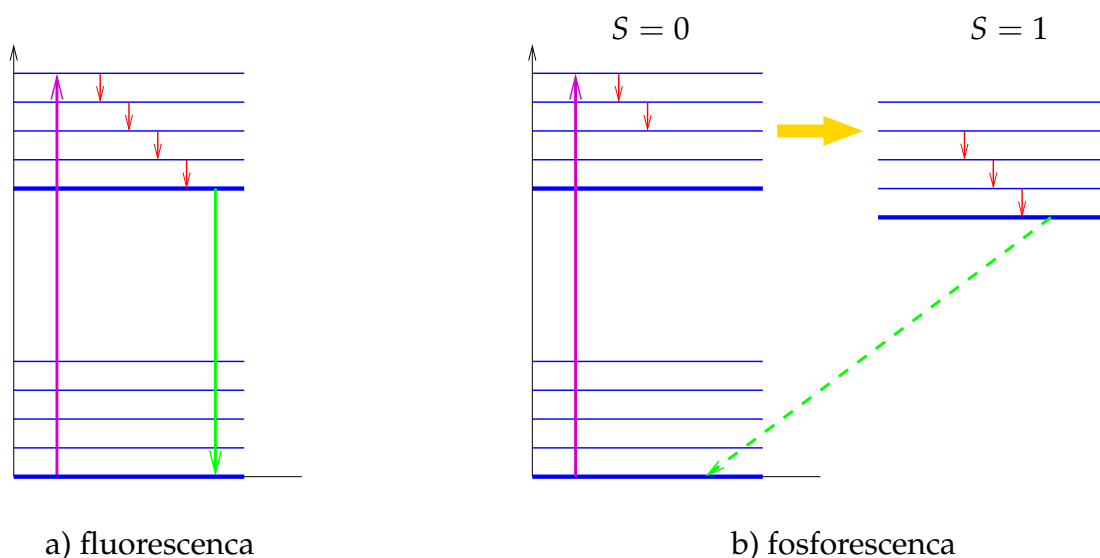
Značilne energije. Elektroni pri absorpciji svetlobe, segrevanjem z električnim tokom ali pri trkih prehajajo v vzbujena stanja. Za molekule so značilna vzbujena stanja valenčnih elektronov, ki sodelujejo pri kovalentni ali ionski vezi med atomi v molekuli. Valenčni elektroni so razmeroma šibko vezani, – značilne energijske razlike so nekaj eV –, in sevajo večinoma v vidnem področju. Valovne funkcije teh elektronov so precej spremenjene glede na valovne funkcije v nevezanih atomih, zato se tudi spekter svetlobe bistveno spremeni. Valovne funkcije elektronov na notranjih lupinah pa se pri vezavi atomov v molekule skoraj ne spremenijo, zato ostanejo nespremenjeni spektri v področju kratkovalovne ultravijolične in rentgenske svetlobe.

Elektronsko vibracijski spektri. V molekuli se lahko hkrati vzbudijo vse tri različne vrste vzbujenih stanj: spremeni se elektronska konfiguracija, molekula vibrira in se hkrati vrti. To je posebno izrazito pri trkih molekul, saj v tem primeru ni potrebno upoštevati izbirnih pravil. Pri absorpciji svetlobe velja izbirno pravilo za elektronsko stanje, za vibracijsko stanje pa ne, saj je harmonski potencial v vzbujenem stanju drugačen kot v osnovnem. Zato lahko molekula pri obsevanju s svetlobo preide na vzbujeno elektronsko in vibracijsko stanje. Iz vzbujenega stanja molekula lahko preide nazaj na osnovno stanje z emisijo svetlobe, ali pa najprej prehaja na nižja vibracijska stanja, pri čemer se vibracijsko kvantno število zmanjšuje za 1 (glej sliko 21 a)). Ko doseže čisto elektronsko stanje, elektron preskoči na osnovno elektronsko stanje ali na katero od vzbujenih vibracijskih stanj, naloženih na osnovnem elektronskem stanju. Izsevana svetloba ima v drugem primeru večjo valovno dolžino kot svetloba, s katero smo molekulo vzbudili.

Fluorescenca. Pojav, ki smo opisali, je *fluorescenca*. Fluorescenčno snov vzbujamo z ultravijolično svetlobo ali svetlobo z dovolj kratko valovno dolžino, snov pa oddaja vidno svetlobo z daljšo valovno svetlobo. Pojav izkoriščajo *varčne svetilke*. V cevi svetilke so živosrebrne pare, ki pri segrevanju sevajo predvsem ultravijolično svetlobo z različnimi valovnimi dolžinami. Ultravijolična svetloba se absorbira na posebnem premazu, ki je nanosen na notranjo stran cevi. Premaz seva vidno svetlobo z različnih delov vidnega spektra, na primer modro, zeleno in rdečo, tako da je oddana svetlobe bele barve.

Fosforescenca. Podoben pojav je *fosforescenca*. Fosforescenčno snov osvetlimo, snov nato dalj časa sveti, kar se lepo vidi v temi.

Tako kot pri fluorescenci z vidno ali ultravijolično svetlobo vzbudimo elektronsko-vibracijsko stanje, ki prehaja v nižja vibracijska stanja z emisijo infrardeče svetlobe ali



Slika 21: Pri fluorescenci snov osvetlimo in snov oddaja svetlobo pri daljši valovni dolžini; pri fosforescenci snov oddaja svetlobo tudi po tem, ko jo prenehamo osvetljevati.

s trki. Pri trku lahko preide v drugo spinsko stanje, če imata obe stanji približno enako energijo (slika 21 b)). Če vez tvorita dva valenčna elektrona, sta v osnovnem stanju lahko sklopljena le v skupni spin 0; to smo spoznali že pri obravnavi vzbujenih stanj helijevega atoma. Pri prehodu na višje vzbujeno stanje pri absorpciji svetlobe ali pri prehodu na nižje stanje pri emisiji svetlobe se mora ohraniti skupni spin; molekula lahko preide le v eno izmed vzbujenih stanj s spinom 0. Pri trkih pa izbirno pravilo za spin ne velja. Molekula lahko pri trku z drugimi molekulami preide v vzbujeno elektronsko in vibracijsko stanje s spinom 1. Podobno kot pri fluorescenci stanje razpada v nižja vibracijska stanja, dokler ne doseže čistega vzbujenega elektronskega stanja s spinom 1. Prehod iz tega stanja v osnovno stanje z emisijo svetlobe ni več dovoljen, saj bi prišlo do spremembe spina. V resnici to pomeni le, da je prehod zelo malo verjeten. Verjetnost je povezana s povprečnim časom, v katerem pride do prehoda, ta pa je lahko zelo dolg, od nekaj minut do nekaj deset minut. Fosforescenčna snov sveti še dolgo po tem, ko smo jo prenehali osvetljevati.

3.4 Zasedenost stanj v segretem plinu.

V poglavju *Osnove statistične fizike* smo spoznali, da v sistemu delcev pri končni temperaturi delci niso le v osnovnem stanju, tj. stanju z najnižjo energijo, temveč zasedajo tudi vzbujena stanja. Število delcev v vzbujenem stanju je odvisne od temperature; višja kot je temperatura, več je delcev v vzbujenih stanjih. Porazdelitev po energijah podaja funkcija

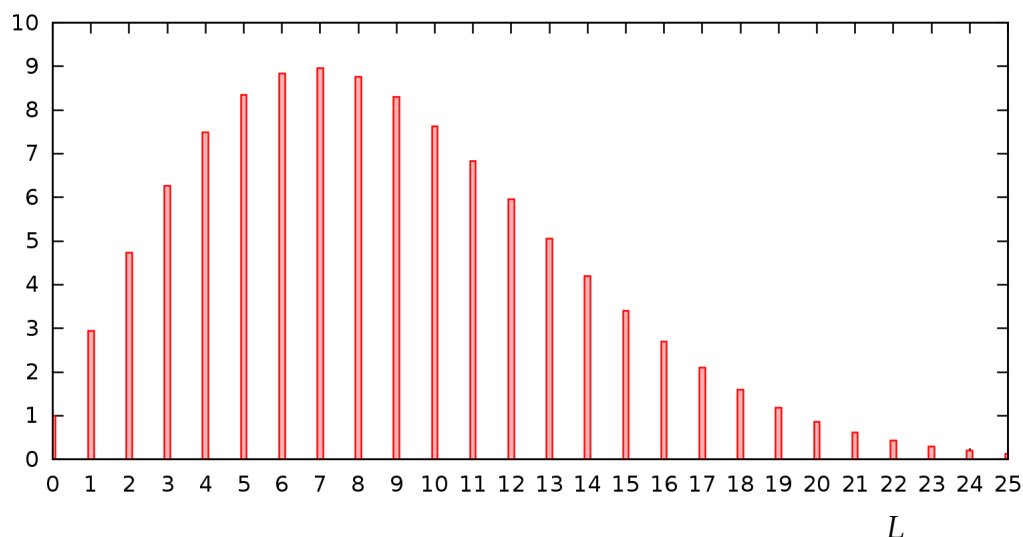
$$n(E) = g(E)f(E, T), \quad f(E, T) = f_{MB}(E, T) = f_0 e^{-E/k_B T},$$

pri čemer je $g(E)$ degeneracija energijskega nivoja, tj. število stanj z energijo E , f je zasedbeno število, ki je v primeru molekul v plinu enako Maxwell-Boltzmannovemu

faktorju f_{MB} , k_B je Boltzmannova konstanta:

$$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}.$$

Konstanto f_0 določimo z zahtevo, da je porazdelitev normirana. V primeru diskretne porazdelitve mora biti vsota n po vseh stanjih enaka 1, pri zvezni porazdelitvi pa to velja za integral po vseh energijah.



Slika 22: Porazdelitev molekul CO po kvantnem številu vrtilne količine L pri temperaturi 300 K. Porazdelitev je normirana tako, da je zasedenost osnovnega stanja 1.

Kot zgled si oglejmo porazdelitev po rotacijskih stanjih molekul. Zanima nas delež molekul v stanjih s kvantnim številom L , glede na osnovno stanje z $L = 0$. Pri izbranem L je število stanj, ki imajo enako energijo, enako $g(E) = 2L + 1$. Dobimo

$$\frac{n(E_L)}{n(E_0)} = \frac{(2L + 1)e^{-E_L/k_B T}}{e^{-E_0/k_B T}} = (2L + 1)e^{-E_L/k_B T} = (2L + 1)e^{-\hbar^2 L(L+1)/2m^*r_0^2 k_B T},$$

saj je $E_0 = 0$. Prvi člen z naraščajočim L narašča, eksponent pa pada. Slika 22 kaže odvisnost zapisanega razmerja za molekule CO pri temperaturi 300 K. Najbolj so zasedena stanja v okolici $L = 7$. Podoben graf dobimo tudi za druge vrste molekul v zraku, tako da lahko ugotovimo, da se v plinu pri sobni temperaturi velika večina molekul živahno vrtili.

4 Zgradba jedra

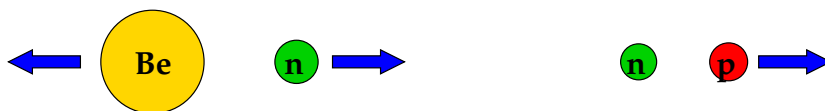
4.1 Gradniki

Pri obravnavi atomov z več elektroni smo spoznali, da je v nevtralnem atomu toliko elektronov, kolikor je v jedru protonov. Število protonov Z določa kemijski element; če atom izgubi ali pridobi elektron, se element ne spremeni, govorimo le o ioniziranem atomu elementa. Številu Z pravimo *vrstno število* elementa. Protoni pa niso edini gradniki jedra, saj so mase jeder večje od vsote mas protonov. Poleg protonov so v jedru *nevtroni*, delci, ki so električno nevtralni in imajo maso približno enako masi protona. Jedro helija ima tako dva protona in dva nevtrona, zato je njegova masa (približno) štirikrat večja od mase vodikovega jedra (ki ga tvori en sam proton).

Gradnike jedra – protone in nevtrone – s skupno besedo imenujemo *nukleoni*.

Odkritje nevtrona. Do odkritja nevtrona leta 1932 ni bilo jasno, če so gradniki jedra poleg protona res tudi nevtralni delci z maso, primerljivo z maso protona. Alternativna razlaga je bila, da je v jedru več dodatnih protonov, poleg njih pa so še elektroni, ki kompenzirajo pozitivni naboj dodatnih protonov. Vedeli so, da nekatera jedra sevajo zelo prodorne nevtralne žarke, če jih obsevajo z žarki alfa. Opazili so tudi, da ti žarki iz snovi izbijajo protone. Ni pa bilo jasno, če gre za nove, še nepoznane delce, ali za fotone z zelo kratko valovno dolžino.

Chadwick je leta 1932 delal poskuse z berilijevim izvorom. Meril je gibalno količino berilijevega jedra, ko je oddalo nevtralni delec, in hkrati gibalno količino protona, ki ga je nevtralni delec izbil iz snovi. S tem je tudi določil velikost in smer gibalne količine nevtralnega delca. Izbiti protoni, ki so leteli v smeri nevtralnega delca so imeli gibalno količino, ki je bila praktično enaka gibalni količini nevtralnega delca. Izid poskusa pojasnimo tako, da se je nevtralni delec pri trku z mirujočim protonom v tarči popolnoma zaustavil, proton pa je prevzel vso njegovo kinetično energijo in gibalno količino. To je možno v primeru, ko imata proton in nevtralni delec enaki masi. Spomnimo se, da pri centralnem trku biljardne kroglice v drugo enako mirujočo kroglico prva obmiruje, druga pa nadaljuje pot z enako hitrostjo, kot jo je imela prva. Chadwick je tako dokazal, da gre res za novo vrsto delca, in je tudi določil njegovo maso.



Slika 23: Mirujoče berilijevo jedro odda nevtron. Ker je nevtron nevtralen, ni mogoče direktno izmeriti njegove gibalne količine; lahko pa jo določimo preko merjenja (nasprotno enake) gibalne količine berilija. V tarči nevtron izbije proton, ki prevzame vso nevtronovo gibalno količino. Od tod je Chadwick sklepal, da imata proton in nevtron (v okviru merskih napak) enako maso.

Masno število, oznake jeder. Število protonov in nevtronov določa v grobem maso jedra – bolj natančno bomo maso jedra obravnavali v naslednjem razdelku. Vsoto

$Z + N$, pri čemer je N število nevtronov, označimo z A in imenujemo *masno število*. Jedro enolično označimo s kemijskim simbolom in masnim številom; ker pa fiziki ne poznamo na pamet vrstnih števil elementov, pogosto eksplicitno navedemo še Z . Pri obravnavi nekaterih procesov zaradi preglednosti navedemo še število nevtronov N . Možne so torej naslednje oznake:

$${}^AX, \quad {}_Z^AX, \quad {}_Z^AX_N, \quad A = Z + N. \quad (4.1)$$

Izotopi. Število nevtronov v jedru izbranega elementa se lahko spreminja. Jedrom z istim vrstnim številom, a različnim masnim številom (različnim številom nevtronov), pravimo *izotopi*. Skoraj vsi elementi imajo več izotopov:

$${}^1\text{H}, \quad {}^2\text{H}, \quad {}^3\text{H}; \quad {}^3\text{He}, \quad {}^4\text{He}; \quad {}^{12}\text{C}, \quad {}^{14}\text{C} \dots \quad (4.2)$$

${}^2\text{H}$ je *težki vodik* ali *deuterij*, ${}^3\text{H}$ je *tricij*, ki pa ni obstojen.

Izobari Jedrom, ki imajo enako masno število, a različno vrstno število, pravimo *izobari*. Primeri so

$${}^3\text{H}, \quad {}^3\text{He} \quad {}^{14}\text{C}, \quad {}^{14}\text{N}, \quad {}^{14}\text{O} \quad \dots$$

4.2 Velikost jedra

Že Rutherford je s poskusom ugotovil, da je velikost jedra znatno manjša od velikosti atoma. Natančno pa velikosti ni uspel izmeriti, saj delci α niso imeli dovolj visoke energije, da bi premagali elektrostatski odboj in se dovolj približali jedru. Danes delamo tovrstne poskuse z elektroni, ki jih pospešimo do zelo visokih energij. Elektroni se si-pajo na jedrih in ustvarjajo značilno uklonsko sliko, kot jo poznamo iz uklona svetlobe na reži. Iz lege prvega minimuma lahko določimo velikost jedra.

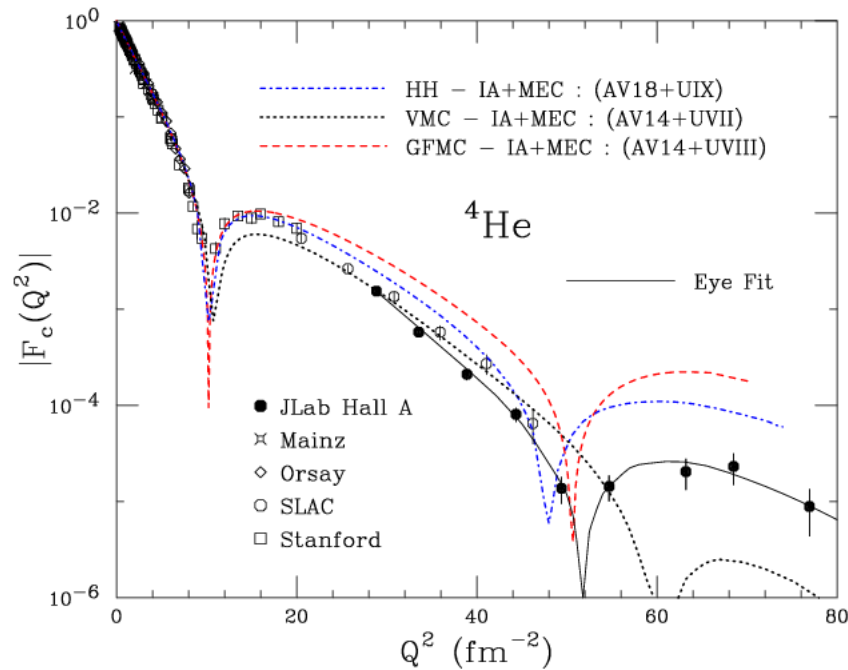
Ocenimo energijo elektronov, ki je potrebna za takšne poskuse. Valovna dolžina mora biti manjša od velikosti tarče, torej velikostnega reda 1 fm (10^{-15} m). Iz de Brogliejeve zveze dobimo ustrezno gibalno količino in energijo elektrona

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad W = \sqrt{p^2c^2 + m_e^2c^4} \approx pc = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240 \text{ eVnm}}{10^{-6} \text{ nm}} = 1,24 \cdot 10^9 \text{ eV} \approx 1 \text{ GeV}.$$

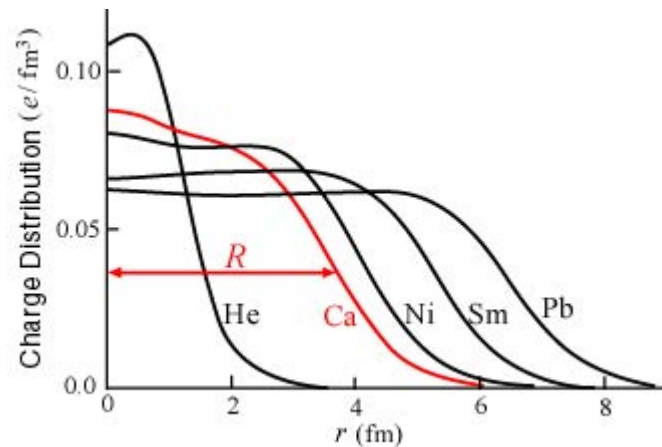
Pri izpeljavi smo upoštevali, da je celotna energija elektrona znatno večja od njegove mirovne energije, $m_e c^2 = 0,51 \text{ MeV}$.

Z analizo uklonjenih elektronov v odvisnosti od kota lahko dobimo natančno informacijo o porazdelitvi naboja v jedru in s tem tudi o porazdelitvi protonov. Privzamemo, da je porazdelitev nevtronov podobna. Razen pri zelo lahkih jedrih je porazdelitev naboja približno enakomerna, nato pa hitro pade proti 0 (slika 25). Polmer jedra r_j (R na sliki 25 definiramo kot vrednost r , pri kateri pade porazdelitev na polovico. Iz eksperimentalnih podatkov ugotovimo, da je polmer kar sorazmeren s tretjim korenom iz masnega števila:

$$r_j = r_0 \sqrt[3]{A}, \quad r_0 = 1,1 \text{ fm}. \quad (4.3)$$



Slika 24: Sipanje visoko energijskih elektronov na helijevem jedru. Količina Q^2 na abscisi je sorazmerna s kvadratom (sinusa) kota, za katerega se elektron odkloni. (Skala na ordinati je logaritemska.) Na sliki sta lepo vidna prvi in drugi minimum, od koder lahko napovemo velikost jedra. Ker rob jedra ni čisto oster, vrednost v minimumu ne pade na nič. <http://inspirehep.net/record/1254863/files/he4fcmecpr1.png>



Slika 25: Porazdelitev protonov v nekaterih jedrih.

Rezultat lahko enostavno interpretiramo, če izračunamo gostoto jedra:

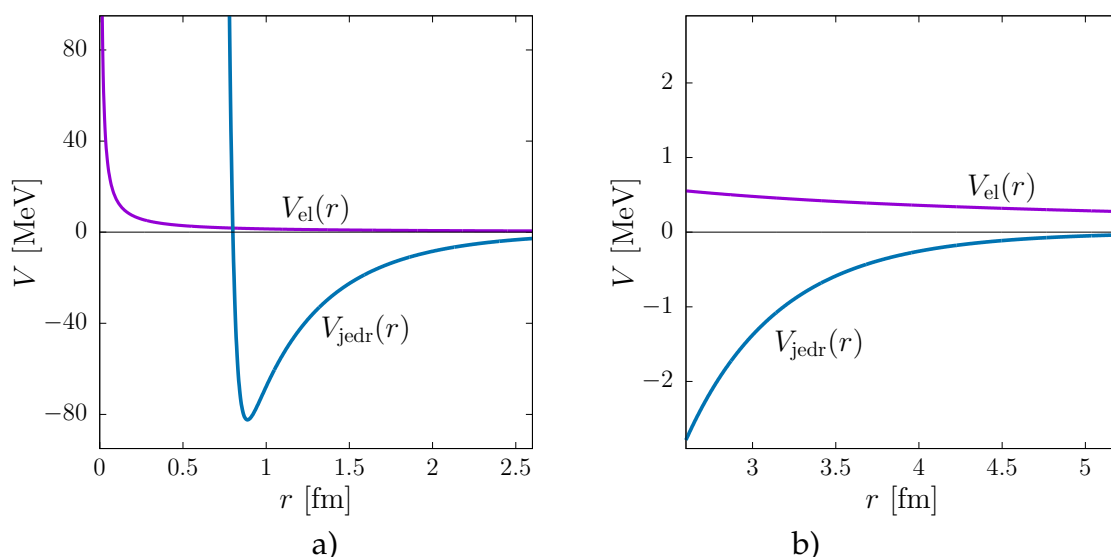
$$\rho_j = \frac{m_j}{V_j} = \frac{m_j}{\frac{4}{3}\pi r_j^3} = \frac{m_N A}{\frac{4}{3}\pi r_0^3 A} = \frac{3m_N}{4\pi r_0^3},$$

kjer smo z m_N označili maso nukleona. Gostota jedra je konstantna; jedrsko snov si najboljše ponazorimo s tekočino protonov in nevtronov.

4.3 Sila med nukleoni

Med protoni v jedru deluje odbojna elektrostatska sila; jedro torej ne bi bilo stabilno, če med njegovimi gradniki ne bi delovala dodatna privlačna sila. Sila mora biti močnejša od elektrostatske, a take sile v makroskopskem in tudi atomskem svetu ne poznamo. Sklepamo, da ima jedrska sila kratek doseg, primerljiv z velikostjo jedra.

Na sliki 26 je prikazan jedrski potencial med dvema nukleonoma, kot ga dobimo iz analize sipanja protona na protonu in nevtronu. V primerjavi z elektrostatskim potencialom (potencialno energijo) $e_0^2/4\pi\epsilon_0 r$ med protonoma vidimo, da pri razdaljah med 0,8 fm in 2,5 fm dominira privlačni jedrski potencial in je elektrostatski zanemarljivo majhen. Pri razdaljah nad 4 fm pa gre jedrski potencial zelo hitro proti 0 in ostane le odbojni elektrostatski potencial.



Slika 26: Potencial med nukleonoma (modra krivulja) v primerjavi z elektrostatskim potencialom med protonoma (rdeča krivulja).

Potencial je enak med dvema protonoma, nevtronoma in med protonom in nevtronom, je pa odvisen od orientacije spinov obeh delcev. Potencial je močnejši, če kažeta spina v isto smer, in šibkejši, če sta nasprotno usmerjena. Na ta način lahko pojasnimo, zakaj v naravi obstaja le vezano stanje protona in nevtrona, ne pa vezano stanje dveh protonov (^2He) ali dveh nevtronov. Protona sta identična delca, zato ne moreta biti hkrati v istem stanju; enako velja za dva nevtrona. Proton in nevtron pa sta različna delca, zato izključitveno načelo zanju ne velja in imata lahko spina obrnjena v isto smer.

Ob tem se spomnimo, da imajo nukleoni poleg potencialne energije tudi kinetično energijo, ki jo lahko ocenimo iz načela nedoločenosti, podobno kot smo to naredili v primeru vodikovega in helijevega atoma. Zaradi zelo majhnih razdalj je ta energija velika nekaj deset MeV in v primeru sistema proton-nevtron (pn) skoraj v celoti kompenzira potencialno energijo. Sistem pn – devteron – je vezan z energijo 2,22 MeV. Ker je potencialna energija v primeru sistema dveh protonov ali dveh nevtronov nekoliko šibkejša, sistema nista vezana.

4.4 Stabilnost jeder

Če se ozremo na periodni sistem elementov, opazimo, da od $Z = 83$ (bizmut) naprej ni več stabilnih elementov. Vzrok za nestabilnost je elektrostatska energija med protoni, ki pri večjih Z postane zelo velika. V prejšnjem razdelku smo spoznali, da ima jedrska sila zelo kratek doseg in praktično deluje le med sosednjimi nukleoni. Če torej povečamo število protonov za ena, se privlačna jedrska potencialna energija poveča le za število nukleonov, ki proton obdajajo; elektrostatska odbojna energija pa za število vseh protonov, ki so v jedru, saj deluje na veliko večjih razdaljah. Zato je razumljivo, da pri dovolj velikem številu protonov prej ali slej prevlada odboj.

4.5 Vrtilna količina

Nukleoni so fermioni in imajo polovični spin. Podobno kot elektronom v atomu lahko tudi jedrom pripišemo vrtilno količino, ki je vsota tirnih vrtilnih količin in spinov.

Razcep po tretji komponenti vrtilne količine opazimo v magnetnem polju.

Oglejmo si, kako je z razcepom v najbolj enostavnem primeru jedra vodika – protona. Izpeljava je podobna kot v primeru elektrona v vodikovem atomu. Za $\vec{B} = (0, 0, B)$ dobimo za energijo

$$W_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{-e_0 \hbar \langle J_z \rangle}{2m_p} B.$$

Razlika glede na elektron je v predznaku naboja in masi v imenovalcu. Ker ni tirnega gibanja, je vrtilna količina kar enaka spinu. V primeru elektrona smo v tem primeru morali tretjo komponento pomnožiti s faktorjem $g = 2$, ki je posledica relativističnih efektov. V primeru protona je ta faktor še znatno večji in meri $g_p = 5,58$. Dobimo

$$W_m = \frac{-e_0 \hbar}{2m_p} B g_p m_s, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}.$$

Ocenimo, koliko meri energijska razlika med stanjema $m_s = -\frac{1}{2}$ in $m_s = \frac{1}{2}$ v primeru polja $B = 1 \text{ T}$.

$$\Delta E = \frac{e_0 \hbar g_p B}{2m_p} = 1,7 \cdot 10^{-7} \text{ eV}, \quad \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 7 \text{ m}. \quad (4.4)$$

Valovna dolžina fotona, ki se izseva pri prehodu med tema stanjema, pade v metrsko področje, torej v področje *radijskih valov*.

Jedrska magnetna resonanca. Pojav izkoriščamo pri metodi jedrske magnetne resonance, s katero lahko nedestruktivno raziskujemo snov. Vzorec postavimo v močno magnetno polje, ki se lahko spreminja s krajem. V vzorec pošljemo radijski signal z valovno dolžino, ki ustreza valovni dolžini prehoda za izbrano vrednost magnetnega polja. Pride do resonančne absorpcije fotona in protoni gredo v vzbujeno stanje s spinom $m_s = -\frac{1}{2}$. Ko radijski signal preneha, se začno protoni vračati v osnovno stanje

z $m_s = \frac{1}{2}$ in pri tem sevajo radijsko valovanje z enako frekvenco, kot je bila frekvenca vzbujanja. Signal pojema eksponentno s karakterističnim časom τ . Izkaže se, da je ta čas odvisen od tega, kako je vodikov atom vezan v snovi. Tako posredno dobimo informacijo o lastnostih snovi na mestu, na katerem je prišlo do resonančne absorpcije. Če spremenimo valovno dolžino radijskega signala, bo prišlo do absorpcije na mestu, kjer je B tolikšen, da je izpolnjena zveza (4.4) med λ in B . Ker vemo, kako se B s krajem spreminja, lahko na ta način prečesmo (skeniramo) celotni vzorec, in dobimo podatke o strukturi snovi.

Metoda (MR) je pomembna v medicini, kjer lahko s skeniranjem delov človeškega telesa odkrivamo spremembe na tkivu in področje sprememb tudi natančno lociramo.

4.6 Vezavna energija

Vezavno energijo vpeljemo tako kot v atomski fiziki. Zanima nas razlika med energijo vezanega sistema nukleonov in energijo, ko nukleoni mirujejo na veliki medsebojni oddaljenosti. V jedrski fiziki postanejo relativistični efekti pomembni, zato primerjamo kar razliko mirovnih energij. Vezavno energijo definiramo kot

$$W = m_j c^2 - Z m_p c^2 - N m_n c^2, \quad (4.5)$$

pri čemer smo na desni strani po vrsti zapisali mirovne energije jedra, Z protonov in N nevtronov. Pri merjenju zapisana oblika ni praktična, saj zelo težko merimo maso samega jedra; veliko lažje merimo maso celotnega atoma (tj. jedra z elektronskim oblakom). Zato prištejemo in hkrati odštejemo mirovno maso Z elektronov:

$$W = m_j c^2 + Z m_e c^2 - Z m_p c^2 - Z m_e c^2 - N m_n c^2 = m_X c^2 - Z m_H c^2 - N m_n c^2, \quad (4.6)$$

kjer je m_X masa nevtralnega atoma elementa X , m_H pa masa atoma vodika.

Povejmo, da je $W < 0$ *potreben* pogoj, da je jedro stabilno, ni pa *zadosten*. Jedro z $W < 0$ lahko razpade na dve manjši jedri ali jedro in še en delec, ki imata skupaj nižjo vezavno energijo od začetnega jedra.

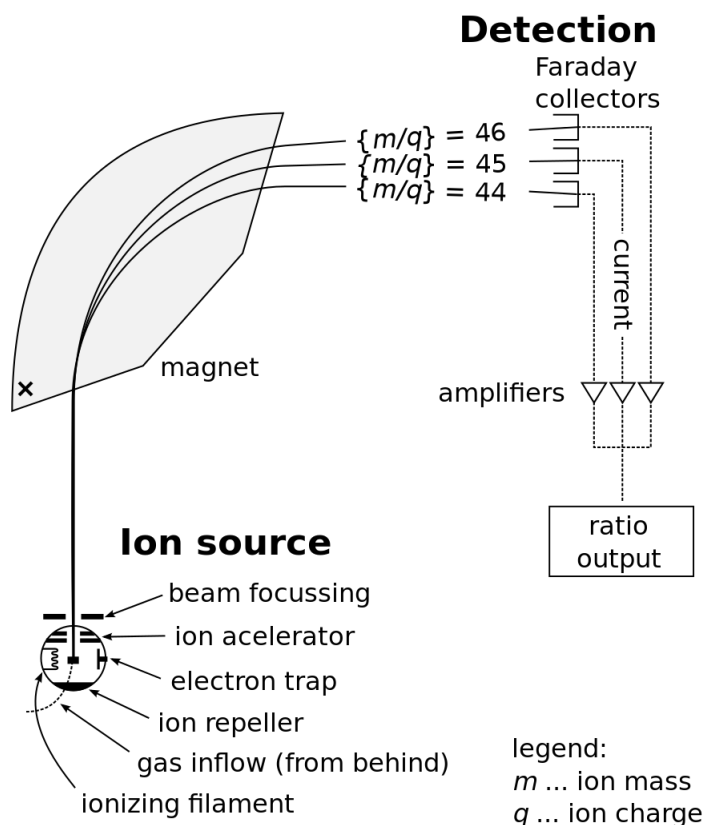
Masni spektrograf. Maso atoma merimo z *masnim spektrografom*. Atome (enkrat ali dvakrat) ioniziramo in pospešimo z napetostjo U_0 . Curek atomov vstopi v konstantno prečno magnetno polje z gostoto B . Izraz za maso dobimo iz znanih enačb

$$\frac{1}{2} m_X v^2 = e U_0, \quad m_X \frac{v^2}{r} = e v B, \quad m_X = \frac{e B^2 r^2}{2 U_0}.$$

(Ker so atomi težki, hitrosti pa majhne, je upravičen nerelativistični račun.) Ioni z manjšo maso se močneje odklonijo, težji manj. Da se izognemo preciznemu merjenju napetosti in gostote magnetnega polja, odklon primerjamo z odklonom iona ^{12}C . Z atomom ^{12}C definiramo masno enoto v mikroskopskem svetu: *atomska enota mase* je dvanajstina mase atoma ^{12}C :

$$u = \frac{m_C}{12} = 1,660538921(73) \cdot 10^{-27} \text{ kg}, \quad u c^2 = 931,494061(21) \text{ MeV}. \quad (4.7)$$

Napaka na zadnjih dveh mestih je navedena v oklepaju. Natančnost tehtanja v mikroskopskem svetu je torej vsaj stokrat boljše kot tehtanje (preko pariškega prakilograma) v makroskopskem svetu.



Slika 27: Shema delovanja masnega spektrometra

http://en.wikipedia.org/wiki/File:Mass_Spectrometer_Schematic.svg

4.7 Semiempirična (Weizsäckerjeva) masna enačba

Z masnim spektrografom lahko določimo le mase stabilnih ali vsaj zelo dolgoživih jeder. Mas velikega števila izotopov ne moremo enostavno izmeriti. Zato je koristno imeti enačbo, iz katere bi lahko čim bolj natančno izračunali vezavne energije in mase jeder v odvisnosti od njihovega vrstnega in masnega števila. Enačbe ne izpeljemo iz prvih principov, saj natančen račun energije vezanih nukleonov zaradi nepoznavanja točne oblike jedrske sile ni možen (razen v primeru dveh in treh nukleonov). Enačbo zapišemo kot vsoto prispevkov z različno odvisnostjo od Z in A ; neznane koeficiente pred temi členi določimo tako, da enačbo prilagodimo znanim masam jeder. Vsak od prispevkov ima določen fizikalni pomen.

Notranja (volumska) energija. Energija nukleona v notranjosti jedra je zaradi zelo kratkega dosega jedrske sile odvisna le od števila najbližjih sosedov, ki se jih nukleon dotika. Ta energija narašča premo sorazmerno s številom nukleonov:

$$W_V = w_0 A, \quad w_0 = -15,6 \text{ MeV}, \quad (4.8)$$

pri čemer je w_0 parameter, ki so ga dobili v postopku prilagajanja (celotne) enačbe znanim mirovnim energijam jeder.

Površinska energija. Nukleoni na površju jedra imajo manj sosedov kot notranji nukleoni. Zaradi tega je vezavna energija jedra manjša (manj negativna). V grobem lahko zapišemo, da je število nukleonov na površju premo sorazmerno s površino jedra (aproksimacija bolje velja za jedra z velikim številom nukleonov in slabše za lahka jedra). Površino jedra izrazimo z A :

$$S = 4\pi r_j^2 = 4\pi (r_0 A^{1/3})^2 = 4\pi r_0^2 A^{2/3}. \quad (4.9)$$

Obdržimo odvisnost od A , vse ostale konstante in parametre pa zapišemo z enim samim parametrom w_1 :

$$W_S = w_1 A^{2/3}, \quad w_1 = 17,3 \text{ MeV}. \quad (4.10)$$

Prispevek je *pozitiven*, saj po velikosti zmanjša (negativno) vezavno energijo.

Coulombska energija. Povedali smo že, da je za nestabilnost težjih jeder odgovorna odbojna sila med protoni. Elektrostatska potencialna energija med protoni prevladuje pri večjih razdaljah (glej sliko 26) in narašča s številom *parov* protonov:

$$W_{el} = \frac{Z(Z-1)}{2} \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{r}}. \quad (4.11)$$

V imenovalcu smo zapisali kar *povprečno* razdaljo med nukleoni. Upravičeno lahko predpostavimo, da je ta razdalja premo sorazmerna z velikostjo jedra (4.3) in ima zato odvisnost od A v obliki $A^{1/3}$. Vse konstante ponovno združimo v prost parameter w_2 in zapišemo

$$W_C = w_2 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}}, \quad w_2 = 0,70 \text{ MeV}. \quad (4.12)$$

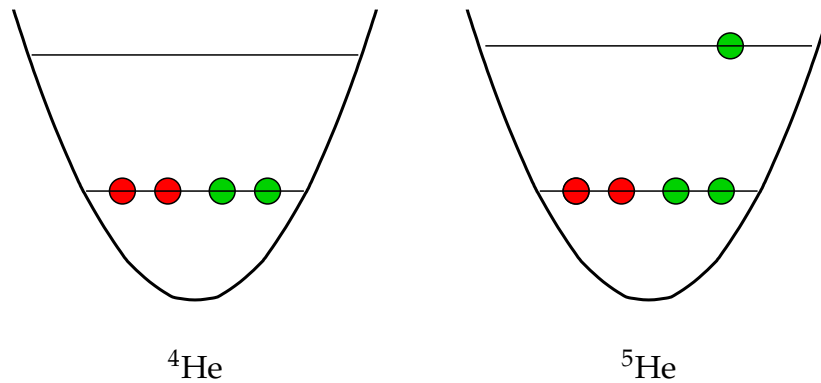
Mešalna energija. Pri lahkih jedrih so najbolj stabilni izotopi izbranega elementa tisti, ki imajo enako število protonov kot nevtronov. To je nenavadno, saj bi pričakovali, da so jedra z večjim številom nevtronov bolj stabilna, saj med nevtroni ter med nevtroni in protoni deluje le jedrska privlačna sila, med protoni pa tudi elektrostatska odbojna.

Gre za kvantni efekt, ki izvira iz *izključitvenega načela*. Gibanje nukleonov v jedru lahko uspešno pojasnimo z *lupinskim modelom*. Nukleon se giblje v tako imenovanem *povprečnem jedrskem potencialu*, ki ga ustvarjajo drugi nukleoni v jedru. Potencial pri lahkih jedrih lahko dovolj dobro aproksimiramo s harmonskim oscilatorjem v treh dimenzijah – če se omejimo na osnovno stanje in nekaj najnižje ležečih vzbujenih stanj. Pri polnjenju stanj velja izključitveno načelo, podobno kot v atomski fiziki. V eno kvantno stanje gresta lahko dva protona s spinoma orientiranima v nasprotnih smereh in prav tako dva nevtrona, saj sta proton in nevtron različna delca. Stanja se torej polnijo tako, da se napolni najnižje stanje z dvema protonoma in dvema nevtronoma; naslednji proton ali nevtron mora iti v višje stanje. Na sliki (28) ilustriramo mehanizem na primeru helija.

Vpliv izključitvenega načela je izražen v *mešalnem* prispevku k vezavni energiji:

$$W_m = w_3 A \frac{(N-Z)^2}{(N+Z)^2} = w_3 \frac{(A-2Z)^2}{A}, \quad w_3 = 23,3 \text{ MeV}. \quad (4.13)$$

Prispevek je enak 0 za $Z = N$ in pozitiven v primeru različnih Z in N .



Slika 28: Struktura helija v lupinskem modelu: na levi je obstojni ${}^4\text{He}$; dva protona in dva nevtrona zapolnjujejo najnižje stanje; na desni dodamo nevtron, ki pa zaradi izključitvenega načela ne more v najnižje stanje, pač pa gre v prvo vzbujeno stanje. Energija tega stanja je znatno višja in zato takšno stanje ne obstaja. (Obstaja pa seveda ${}^3\text{He}$, saj je v tem primeru le en nevtron v najnižjem stanju.)

Paritvena energija. Izkaže se, da se vezavna energija poveča, če je v jedru sodo število nukleonov iste vrste. Pomeni, da je energijsko ugodneje, če se protoni vežejo v pare in prav tako nevtroni (ne pa protoni z nevtroni). Prispevek k energiji izrazimo z enačbo

$$W_p = w_4 \delta_{ZN} A^{-1/2}, \quad \delta_{ZN} = \begin{cases} -1, & Z \text{ sod}, N \text{ sod} \\ 0, & Z \text{ sod}, N \text{ lih ali } Z \text{ lih}, N \text{ sod} \\ 1, & Z \text{ lih}, N \text{ lih} \end{cases}, \quad w_4 = 11,2 \text{ MeV}. \quad (4.14)$$

4.8 Stabilni izotopi.

Semiempirična masna enačba ima torej obliko

$$W(A, Z) = w_0 A + w_1 A^{2/3} + w_2 Z(Z-1) A^{-1/3} + w_3 \frac{(A-2Z)^2}{A} + w_4 \delta_{ZN} A^{-1/2}. \quad (4.15)$$

Iz enačbe lahko določimo, kateri Z ustreza najbolj stabilnemu izotopu pri izbranem masnem številu A . Zahtevamo

$$\begin{aligned} \frac{\partial W(A, Z)}{\partial Z} &= 0, & w_2 (2Z-1) A^{-1/3} - 4w_3 \frac{(A-2Z)}{A} &= 0, \\ Z_0(A) &= \frac{\frac{1}{2} A \left(1 + \frac{w_2}{4w_3} A^{-1/3} \right)}{\left(1 + \frac{w_2}{4w_3} A^{2/3} \right)} \approx \frac{\frac{1}{2} A}{1 + \frac{w_2}{4w_3} A^{2/3}}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

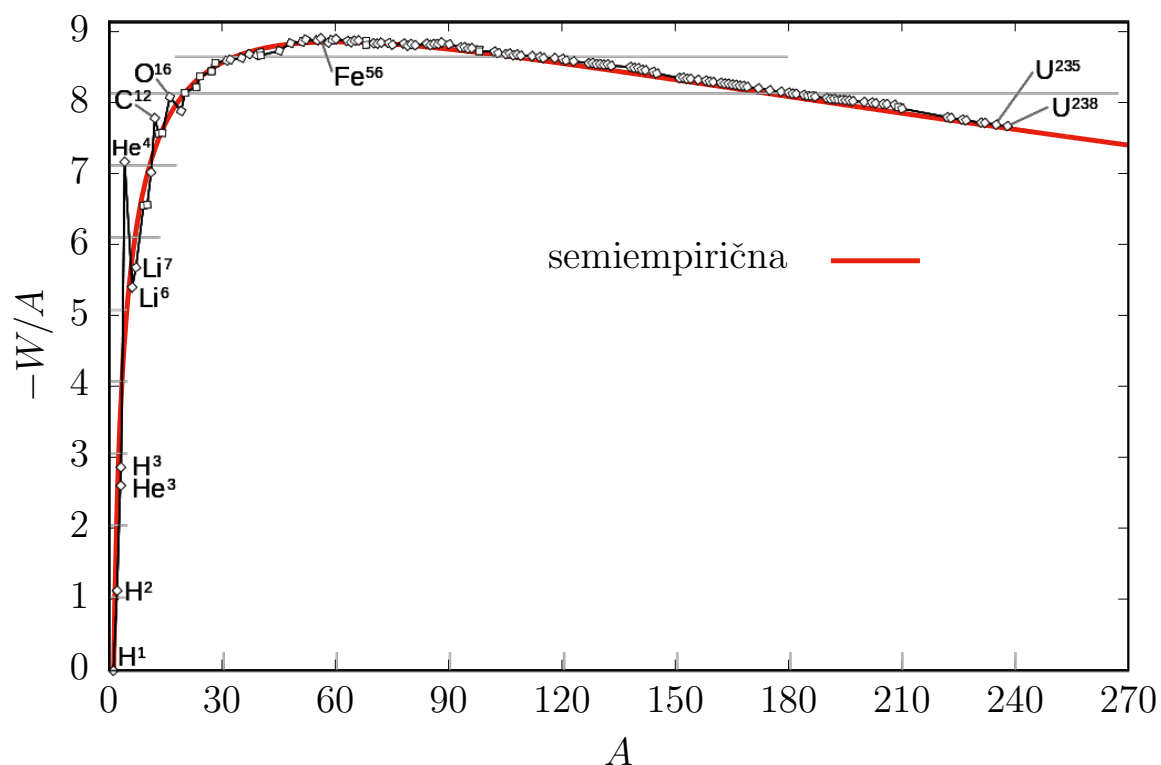
Rezultat moramo zaokrožiti na najbližje naravno število. Koeficient $\frac{w_2}{4w_3}$ v imenovalcu je zelo majhen, zato je v območju dovolj majhnih A rešitev enačbe kar $Z_0(A) = \frac{1}{2} A =$

N . Pri večjih A pa postane drugi člen v imenovalcu znaten, in optimalen Z_0 postane manjši od $\frac{1}{2}A$.

Iz enačbe lahko izračunamo vezavne energije najbolj stabilnih izotopov v odvisnosti od A . Na sliki 29 nanašamo (negativno) vrednost vezavne energije *na nukleon*:

$$w(A) = -\frac{W(A, Z_0(A))}{A}.$$

Vidimo, da vezavna energija nukleona po velikosti narašča do izotopa železa ${}^{56}_{26}\text{Fe}$, nato pa počasi pada.



Slika 29: Vezavne energije stabilnih izotopov: primerjava eksperimentalnih vrednosti z odvisnostjo, kot jo podaja semiempirična masna enačba.

5 Jedrski razpadi

Jedra v vzbujenih stanjih in nestabilna jedra razpadajo. Ločimo tri glavne mehanizme:

- a) razpad gama
- a) razpad beta
- a) razpad alfa

5.1 Razpad gama

Pri razpadu gama jedro v vzbujenem stanju odda foton. Tako kot pri molekulah ločimo glavne vrste vzbujenih stanj:

- a) enodelčna vzbujena stanja
- a) vibracijska stanja
- a) rotacijska stanja

Enodelčna vzbujena stanja. Kot smo že omenili v prejšnjem poglavju, lahko jedro dobro opišemo z lupinskim modelom. Nukleon se giblje v potencialu, ki ga ustvarjajo drugi nukleoni. Pri lahkih jedrih lahko takšen potencial aproksimiramo s trirazsežnim harmonskim oscilatorjem, ki pa se ne razteza v neskončnost. Pri težjih jedrih je boljši približek končna ravna potencialna jama. Ocenimo za primer harmonskega oscilatorja energijsko razliko med vzbujenimi stanji. Vzbujena stanja so enakomerno razmaknjena $\Delta E = \hbar\omega$. Klasično frekvenco lahko povežemo s parametrom b , ki predstavlja značilno dimenzijo sistema, $b = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Dobimo

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{mb^2} \approx \frac{\hbar^2 c^2}{m_p c^2 r_j^2}.$$

Če vzamemo $r_j \approx 3$ fm, dobimo $\Delta E \approx 4$ MeV. Valovna dolžina svetlobe, ki se pri tem izseva, meri $\lambda = hc/\Delta E \approx 3 \cdot 10^{-4}$ nm. Valovna dolžina je bistveno krajša od rentgenske svetlobe, kot smo jo spoznali pri obravnavi atomskih spektrov. Govorimo o *sevanju gama*. Značilne energije pri enodelčnih prehodih so velikostnega reda 1 MeV.

Vibracijski in rotacijski spektri. Pri vibracijskih in rotacijskih vzbujenih stanjih dvoatomnih molekul je bila slika jasna: atomski jedri nihata drugo proti drugemu, oziroma krožita okoli skupnega težišča. Energije teh stanj so bile bistveno manjše od enodelčnih elektronskih vzbujenih stanj. Pri jedru slika ni tako preprosta. Krogelno simetrična jedra ne nihajo niti ne rotirajo; to je možno le, če je jedro deformirano. Energije vibracijskih in rotacijskih stanj niso bistveno manjše od enodelčnih (kot v primeru molekul); tipično so manjše od enodelčnih za faktor 10.

Žarki gama so se veliko prodornejši od rentgenskih žarkov. Pri absorpciji prevladujeta Comptonsko sipanje in tvorba parov. Prodirajo skozi nekaj centimetrov debele plasti kovin.

5.2 Razpad beta

Nevtron ni stabilen delec; razpade po 880 s v proton in elektron: $n \rightarrow p + e$. Razpad je energijsko možen, saj je mirovna energija nevtrona, 939,56 MeV, večja od vsote mirovnih energij protona, 938,27 MeV, in elektrona, 0,51 MeV. Prav tako se pri razpadu ohranja naboj. Vsi trije delci so fermioni s polovičnim spinom; proton in elektron lahko sklopimo v spin 0 ali 1, kar pa ni enako začetnemu spinu nevtrona. Vrtilna količina se torej ne ohranja. Pri procesih med delci se mora ohranjati tudi skupno število fermionov, kar pri razpadu, kot smo ga zapisali, ni res, saj je na začetku en fermion, na koncu pa dva. Povejmo še, da pri štetju fermionov pripišemo antidelcu fermionsko število $= -1$. Pri tvorbi parov, na primer para elektron-pozitron, je skupno fermionsko število 0, saj je elektron delec, pozitron pa njegov antidelec. Problem ohranitve fermionskega števila pri razpadu nevtrona lahko razrešimo, če predpostavimo, da pri procesu nastane še antidelec brez naboja – *antineutrino*. Celoten razpad potem zapišemo

$$n \rightarrow p + e + \bar{\nu}.$$

Razpad prostega protona energijsko ni mogoč. Pač pa je mogoč znotraj jedra, če je proton v višjem energijskem stanju kot nevtron, ki nastane pri razpadu. Razpad protona v jedru torej lahko zapišemo

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu.$$

Pri razpadu nastane pozitron, ki poskrbi za ohranitev naboja; ker je pozitron že antidelec, ima tretji nastali delec fermionsko število 1; delec je *neutrino*. Antineutrino, ki smo ga spoznali pri razpadu nevtrona, je njegov antidelec.

Nevtrino je brezmasni delec in ga je izjemno težko detektirati. Dokler nevtrina še niso poznali, se je zdelo, da se pri razpadih beta ne ohranjata niti energija niti gibalna količina. Obstoj nevtrina so nedvoumno potrdili šele leta 1953.

V jedru lahko razpadajo tako nevtroni v protone kot protoni v nevtrone. V prvem primeru govorimo o razpadu β^- (beta minus), v drugem primeru o razpadu β^+ . Oznaka se nanaša na elektron oziroma pozitron, ki pri tem nastane in zapusti jedro. (Pri prvih opazovanjih radioaktivnih razpadov so zaznali delce – žarke –, ki so se v magnetnem polju odklanjali tako kot negativno ali pozitivno nabiti delci, a na začetku še niso mogli vedeti, da gre zares za elektrone in pozitrone.) Pri razpadih se vrstno število spremeni, masno pa se ohrani:

$${}_Z^AX_N \rightarrow {}_{Z+1}^AY_{N-1} + e + \bar{\nu}. \quad \text{razpad } \beta^-, \quad (5.1)$$

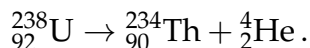
$${}_Z^AX_N \rightarrow {}_{Z-1}^AZ_{N+1} + e^+ + \nu. \quad \text{razpad } \beta^+. \quad (5.2)$$

Beta žarki imajo precej manjšo prodornost od žarkov gama; zaustavi jih že nekaj milimetrov debela plast aluminija. Imajo pa večjo ionizacijsko sposobnost od žarkov gama, zato lahko v tkivu povzročijo več škode.

5.3 Razpad alfa

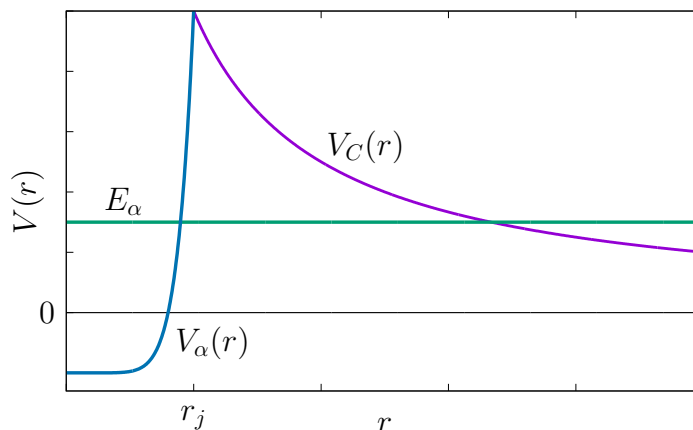
Pri razpadu alfa jedro odda delec alfa, za katerega smo že povedali, da je jedro ${}^4_2\text{He}$. Pri tem se jedru spremenita tako vrstno kot masno število. Značilen primer za razpad

alfa je razpad urana v torij



Razpad poteka izjemno počasi; razpolovna doba – to je čas, v katerem se začetno število razpadajočih delcev razpolovi – meri $4,5 \cdot 10^9$ let. To je približno toliko, kolikor je stara Zemlja. Uran je nastal v eksplozijah supernov v času pred nastankom Zemlje in za svojo prisotnost se ima zahvaliti izjemno počasnemu razpadu; če bi razpad potekal hitreje, danes urana ne bi bilo več v Zemljini skorji.

Kako pojasnimo počasni razpad? V jedrih obstaja močna težnja, da se po dva protona in dva nevtrona vežeta v delec α , ki pri gibanju znotraj jedra ohranja svojo identiteto. Nekatera jedra, na primer ${}_{6}^{12}\text{C}$ ali ${}_{8}^{16}\text{O}$, dobro opišemo kot strukturo, sestavljeno iz treh oziroma štirih delcev α . S tem pojasnimo močnejšo vezavno energijo za ti dve jedri (slika 29). Pri težjih jedrih si mislimo, da se delec α kot celota giblje v povprečnem



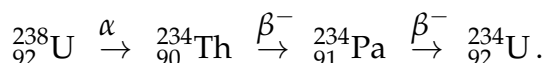
Slika 30: Potencial, kot ga čuti delec α (helijevo jedro) pri razpadu α .

(privlačnem) jedrskem potencialu. Hkrati čuti močni odbojni potencial, ki ga ustvarja $Z - 2$ protonov: $V_C(r) = 2(Z - 2)e_0^2/4\pi r$ (glej sliko 30). Ker je razpad energijsko možen (v našem primeru je mirovna energija ${}_{92}^{238}\text{U}$ večja od vsote mirovnih energij ${}_{90}^{234}\text{Th}$ in ${}_2^4\text{He}$) je energija delca α znotraj jedra pozitivna. A če hoče uiti na prosto, mora premagati potencialno bariero, ki jo ustvarjata privlačni jedrski in odbojni elektrostatski potencial. To pa je situacija, ki smo jo spoznali pri tuneliranju. Delec α lahko uide iz jedra le s tuneliranjem. Pri OMF smo izpeljali, da verjetnost za prehod eksponentno pojema s širino prepovedanega območja in korenem iz višine bariere. Čeprav smo izpeljavo naredili za potencial pravokotne oblike v eni razsežnosti, rezultat kvalitativno velja tudi za naš primer. Iz slike opazimo, da je verjetnost za tuneliranje močno odvisna od energije delca α , saj se pri nižjih energijah širina prepovednega območja znatno poveča (glej presečišča potenciala z zeleno črto na sliki 30.)

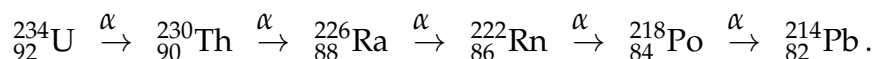
Žarki alfa imajo zelo kratek doseg; celo v zraku le nekaj centimetrov. Nevarni so v primeru, če pridejo v neposredni stik s tkivom. Zaradi izjemno velike ionizacijske sposobnosti povzročajo veliko, pogosto nepopravljivo škodo na tkivu. Tak primer je radon (${}_{86}^{222}\text{Rn}$), ki je plin, in pride v stik s tkivom preko vdihavanja.

5.4 Radioaktivni nizi

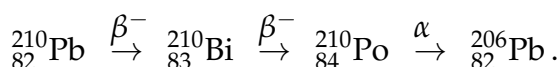
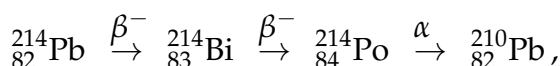
Produkti razpadov α in β običajno niso stabilni in razpadajo naprej, dokler ne dosežejo stabilnega jedra. Oglejmo si to na primeru razpada ^{238}U . Nastali torij ni stabilen in razpada naprej. Vemo, da imajo težka jedra velik presežek nevtronov; pri razpadu α se jedro znebi dveh protonov in dveh nevtronov; razmerje med nevtroni in protoni se zaradi tega povečuje, namesto da bi se zmanjševalo, ko gremo k lažjim jedrom. Presežka nevtronov se jedro znebi z razpadom β^- , pri katerem se nevtron spremeni v proton. Torij zato razpade z razpadom β^- in se tako znebi presežka nevtronov. Zaporedje razpadov v prvem koraku je takšno:



Niz od tu dalje poteka takole



Nastali svinec ima veliko preveč nevtronov; stabilni izotopi svinca imajo 204, 206, 207 in 208 nukleonov. Odvečnih nevtronov se svinec znebi z dvema nizoma razpadov:



V naravi poteka razpad urana (in drugih radioaktivnih izotopov) v zemeljski skorji in energija, ki se pri tem sprošča, segreva Zemljino notranjost. V nekateri predelih se nastali helij zbira v podzemskih votlinah, od koder ga črpajo na površje. Poleg resne uporabe se ta helij uporablja tudi za polnjenje balonov.

Večino razpadov β^- spremlja tudi razpad γ . Pri razpadu nevtrona se nastali proton znajde v višjem protonskem stanju, pod katerim so nezasedena protonska stanja. Pri prehodu v nižje stanje proton odda žarek gama (foton).

5.5 Aktivnost

Pri detekciji radioaktivnih razpadov nas zanima *aktivnost* vzorca. Definiramo jo kot število razpadov v časovni enoti, $A = dN_r/dt$. Izpeljimo, kako se aktivnost in število še nerazpadlih jeter spreminja s časom. Osnovna predpostavka je, da je za posamezno jedro v vsakem trenutku enaka verjetnost, da razpade. V dovolj kratkem časovnem intervalu je verjetnost kar premo sorazmerna z dolžino intervala:

$$\Delta P = \frac{\Delta N_r}{N} = \lambda \Delta t.$$

Verjetnost smo izrazili z razmerjem med številom jeter, ki razpadejo, in celotnim številom jeter. Tu je λ *razpadna konstanta*, značilna za določen razpad. Ker se število jeter v vzorcu zmanjša za toliko, kolikor jih razpade, lahko enačbo v limiti, ko gre Δt proti 0, prepišemo v obliko

$$dN = -dN_r = -\lambda N dt.$$

Rešitev enačbe poznamo

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \quad N_0 = N(t=0).$$

Število radioaktivnih jeder se torej zmanjšuje eksponentno. Za aktivnost dobimo

$$A(t) = \frac{dN_r}{dt} = -\frac{dN}{dt} = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = \lambda N(t). \quad (5.3)$$

Aktivnost je torej kar premo sorazmerna s številom radioaktivnih jeder. Namesto λ uporabljamo tudi karakteristični čas τ ali razpolovni čas $t_{1/2}$ – čas, ko se število jeder zmanjša na polovico začetnega. Velja

$$\tau = \frac{1}{\lambda}, \quad \frac{1}{2}N_0 = N_0 e^{-\lambda t_{1/2}}, \quad t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \tau \ln 2.$$

Pri zelo dolgih razpadnih časih (manjnih λ), se eksponentna funkcija praktično ne spreminja s časom. Spreminjanje zaznamo, če τ meri nekaj dni ali manj. Zato se pri dolgoživih jedrih tudi aktivnost s časom praktično ne spreminja in jo lahko vzamemo za konstantno.

Enačba (5.3) omogoča, da lahko z merjenjem aktivnosti in ob poznavanju razpadne konstante določimo število radioaktivnih jeder v vzorcu. Omenimo le eno izmed številnih praktičnih uporab te enačbe: določanje starosti vzorcev z metodo ^{14}C . Izotop ^{14}C ni obstojen in razpada z razpadom β^- v stabilno jedro dušika ^{14}N z razpolovnim časom $t_{1/2} = 5730 \pm 40$ let. Izotop ^{14}C nastaja v atmosferi v reakciji $n + ^{14}\text{N} \rightarrow ^{14}\text{C} + p$. Nevtroni, ki sprožijo reakcijo, so del kozmičnega sevanja, ki prihaja na Zemljo. Nastali ^{14}C absorbirajo rastline in ga skupaj s ^{12}C pri fotosintezi vgradijo v svoje tkivo. Ko rastlina odmre, fotosinteza ne poteka več, in absorpcija ^{14}C se prekine. S časom se delež radioaktivnega ^{14}C zmanjšuje. Ker poznamo razmerje med ^{14}C in ^{12}C ob času odmrtnosti rastline, in če izmerimo ta delež po določenem, dovolj dolgem času, lahko od tod sklepamo, koliko časa je minilo od odmrtnosti. Število jeder ^{14}C v vzorcu določimo s pomočjo enačbe (5.3) z merjenjem aktivnosti vzorca, število vseh atomov ogljika pa s kemijsko analizo. Na ta način lahko določamo starost lesenega orodja, lesenih hiš in drugih predmetov rastlinskega izvora do starosti 60 000 let.

6 Jedrske reakcije

6.1 Reakcijska energija

Za razliko od razpadov sta pri reakcijah v začetnem stanju dva delca, v končnem pa dva ali več. Za primer reakcije $A + B \rightarrow C + D$ definiramo reakcijsko energijo kot

$$Q = m_C c^2 + m_D c^2 - (m_A c^2 + m_B c^2).$$

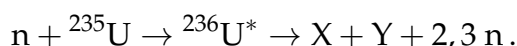
Če je $Q < 0$, se pri reakciji energija sprošča; govorimo o *eksotermni* reakciji. V tem primeru je kinetična energija produktov večja od kinetične energije začetnih delcev. Pri *endotermni* reakciji je $Q > 0$ in začetnima delcema moramo energijo dovesti. Pomeni, da morata začetna delca imeti dovolj veliko kinetično energijo, da lahko sprožita reakcijo. Pri endotermni reakciji se torej del kinetične energije porabi za povečanje mirovne energije (mase) nastalih produktov.

Oglejmo si primera dveh značilnih reakcij: razcepa urana in zlivanja vodika v helij.

6.2 Razcep urana (jedrska fizija)

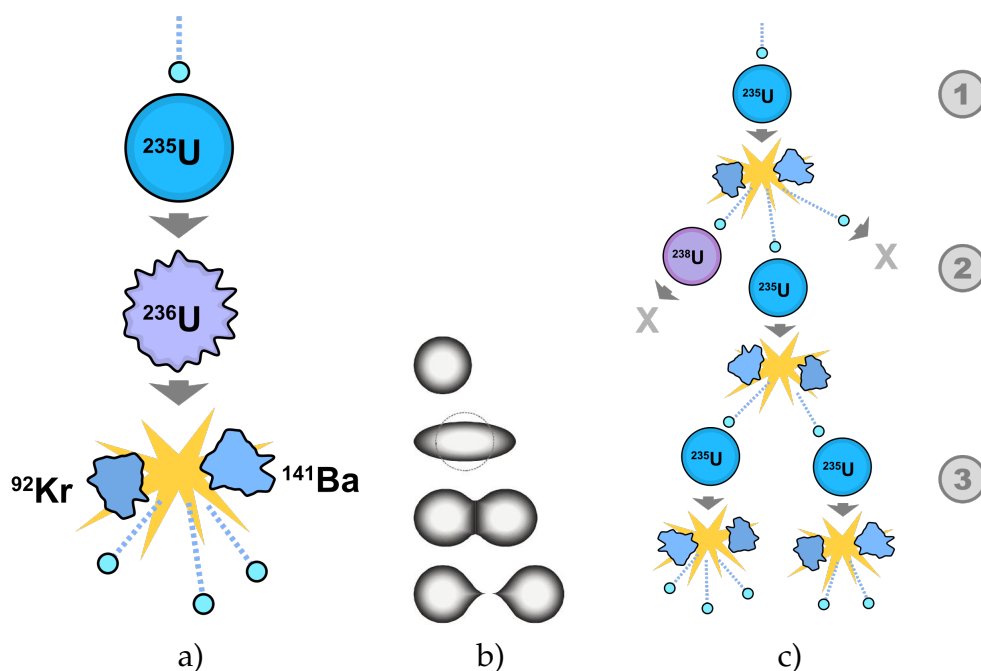
Pri razcepu neobstoje jedro razpade na dve lažji jedri, ki imata obe skupaj manjšo mirovno energijo od začetnega jedra. Tudi če je proces energijsko možen, je verjetnost za razcep zelo majhna, saj ga — podobno kot pri razpadu α — preprečuje visoka potencialna bariera. Do takšnega *spontanega* razcepa prihaja šele pri jedrih v področju urana. Razcep lahko vzbudimo tako, da jedra obstreljujemo z nevtroni. Najbolj znan je razcep urana, ki ga poznamo kot proces, ki poteka v jedrskih elektrarnah.

Pri vzbujenem razcepu urana se nevtron z majhno kinetično energijo absorbira v izotopu urana ^{235}U . Pri tem najprej nastane vzbujeno jedro ^{236}U v visokem vibracijskem stanju, ki nato naprej razpade v dve srednje težki jedri in na dva ali tri nevtrone.



Pri razcepu enega jedra se sprosti okoli 200 MeV energije. Vmesno vibracijsko stanje, pri katerem dve polovici jedra z razmeroma visoko energijo nihata druga proti drugi, je odločilno pri premagovanju potencialne bariere. Začetno stanje nevtrona in jedra ^{235}U ima precej višjo energijo kot osnovno stanje jedra ^{236}U , saj je ^{236}U sodo-sodo jedro in močnejše vezano od ^{235}U , ki sodo-liho jedro. Zato jedro ^{236}U po absorpciji nevtrona niha v vzbujenem vibracijskem stanju z energijo, ki je enaka razliki med začetno mirovno energijo nevtrona in jedra ^{235}U in mirovno energijo jedra ^{236}U . Razcep jedra je zato veliko verjetnejši, kot če bi bilo vmesno jedro v osnovnem stanju.

Pri opisanem vzbujanju reakcije z nevtroni je pomembno, da ima nevtron čim manjšo kinetično energijo, saj je verjetnost za absorpcijo nevtrona veliko večja za počasne nevtrone kot za hitre. Proces z nizko energijskimi nevtroni pa ni možen pri uranu ^{238}U (sodo-sodo jedro), saj bi imelo jedro ^{239}U (sodo-liho jedro), ki bi nastal pri absorpciji nevtrona, višjo energijo od začetnih delcev. Reakcijo bi lahko sprožili hitri nevtroni, a je verjetnost za absorpcijo nevtrona v tem primeru veliko manjša kot v primeru počasnih nevtronov.



Slika 31: Na levi sliki (a) se počasni nevtron absorbira v jedru ^{235}U in nastane vzbujeno stanje ^{236}U . Jedro razpade v dve približno enaki jedri (kriptona in barija na naši sliki) in tri nevtrone. Slika (b) kaže nihanje vzbujenega jedra ^{236}U , ki na koncu razpade v dve jedri. Slika (c) kaže verižno reakcijo. Po razcepu prvega jedra urana, se dva od nastalih nevtronov absorbirata v okoliških jedrih, a ne sprožita razcepa, tretji nevtron pa se absorbira v jedru ^{235}U in sproži novo reakcijo (2). V tej reakciji se oba nastala nevtrona absorbirata v jedrih ^{235}U in sprožita dve novi reakciji (3).

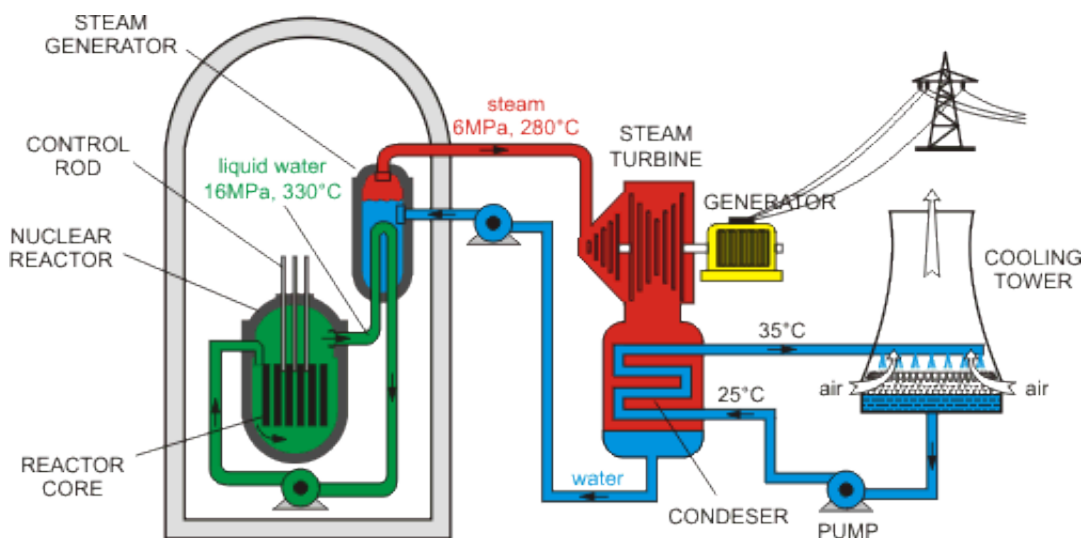
http://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_fission.

V naravi je le 0,7 % ^{235}U , ostalo je uran ^{238}U . Če želimo sprožiti verižno reakcijo, potrebujemo vzorec z večjo koncentracijo ^{235}U . To dosežemo z *bogatenjem* urana, pri čemer se uran kemijsko veže v uranov heksafluorid (UF_6), ki je v plinastem stanju. Lažje molekule, ki vsebujejo ^{235}U , lahko z ultracentrifugami ali z *difuzijo* separiramo od težjih, saj lažje molekule hitreje difundirajo skozi polprepustne membrane.

Verižna reakcija. Nevtroni, ki nastanejo pri reakciji, se lahko absorbirajo v ^{235}U in sprožijo novo reakcijo, nastali nevtroni pa spet novo. Če je v vzorcu prisotnih veliko jeder ^{235}U , število nevtronov in število razcepov hitro narašča. Dobimo nekontrolirano reakcijo – *atomska bombo*. Če je število premajhno, reakcija zamre. Pri *jedrskem reaktorju* želimo, da reakcija poteka stacionarno, tako da je število reakcij v časovni enoti konstantno. To dosežemo s kontrolo števila nevtronov. Zagotoviti moramo, da v povprečju le en nastali nevtron sproži novo reakcijo. Govorimo o *kontrolirani fiziji*, kot poteka v jedrskih reaktorjih. Za uravnavanje števila nevtronov skrbijo kontrolne palice, v katerih je snov, ki dobro absorbira nevtrone (na primer kadmij). Hkrati moramo tudi zagotoviti, da so nevtroni, ki ostajajo v reaktorju, dovolj počasni, da lahko sprožijo novo reakcijo. Snov, ki upočasni nevtrone, nastale pri reakciji, imenujemo *moderator*. Najbolj pogost moderator v jedrskih reaktorjih je kar voda. Ko nevtron trči z jedrom vodika, ki

je vezan v molekuli vode, preda protonu velik del svoje energije — tako kot biljardna kroglica, ki trči v drugo —, saj imata proton in nevtron skoraj enako maso. Po približno dvajsetih trkih se nevtroni *termalizirajo*, pomeni, da njihova kinetična energija ustreza $\frac{3}{2}kT$. Izkaže se, da je verjetnost za trk veliko večja v primeru devterija, ${}^2_1\text{H} \equiv \text{D}$, zato je *težka voda*, D_2O , najbolj učinkovit — a drag — moderator.

Jedrski reaktor. Slika 32 kaže delovanje jedrskega reaktorja v okolju jedrske elektrarne. V primarnem krogu znotraj stolpa, ki zdrži ekstremne tlake, je jedrski reaktor,



Slika 32: Shema jedrske elektrarne.

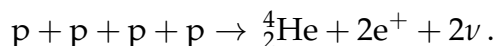
<http://pungunsun.com/wp-content/uploads/2011/08/nukereactor1.gif>.

ki segreva vodo v primarnem krogu pri tlaku 16 MPa in temperaturi 330 °C. V reaktorju so gorivne palice, napolnjene s tabletkami obogatene urana. Med njimi so kontrolne palice, ki vsebujejo element (kadmij), ki absorbira nevtrone. Te palice skrbijo za stacionarno delovanje reaktorja. Če gre karkoli narobe, palice padejo v reaktor in zadušijo njegovo delovanje. Kot moderator se v večini reaktorjev uporablja kar navadna voda. Primarni krog segreva paro v sekundarnem krogu, ki poganja turbine. Tretji krog je povezan s hladilnimi stolpi in skrbi za kondenzacijo pare v kondenzorju na izhodu turbine.

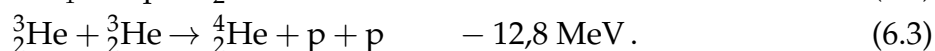
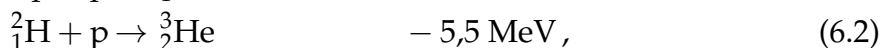
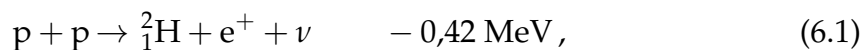
6.3 Jedrsko zlivanje (fuzija)

Zlivanje jeter je najpomembnejša reakcija v naravi. Zagotavlja skoraj neizčrpen vir energije zvezdam in je odgovorna za nastanek elementov, težjih od vodika.

V prvi etapi pri zlivanju vodika nastaja helij. To je proces, ki zagotavlja energijo Soncu. Formalno lahko reakcijo zapišemo kot



Pri tem dva protona razpadeta z razpadom β^+ v dva nevtrona, dva pozitrona in dva nevtrina. Vendar reakcija v tej obliki ne poteka, saj je verjetnost, da bi se na istem mestu ob istem času znašli štirje protoni, neskončno majhna. Reakcija poteka v več korakih v obliki binarnih reakcij:



V celoti se pri tvorbi helija iz štirih protonov sprosti 26,7 MeV energije.

Glavna težava pri vseh reakcijah zlivanja elementov je elektrostatski odbojni potencial, ki ga čutita delca, ki vstopata v reakcijo. Na sliki 26 je prikazana potencialna energija med protonoma v odvisnosti od razdalje. Do razdalje okoli 4 fm prevladuje elektrostatski odboj, pod to razdaljo pa protona „potegne“ skupaj jedrska sila. Zato mora biti njuna kinetična energija dovolj velika, da se lahko dovolj približata. V notranjosti zvezd naraste temperatura vodika na 15 milijonov kelvinov kot posledica adiabatskega krčenja vodika pod vplivom gravitacijske sile. Tolikšna temperatura zadošča, da reakcija lahko steče.

Nastanek težjih elementov Opisana reakcija poteka v zvezdah, manjših ali približno enakih našemu Soncu. Pri večjih zvezdah se jedro zvezde iz nastalega helija naprej krči in temperatura narašča. Ko doseže približno 100 milijonov kelvinov, steče reakcija zlivanja ${}^4_2\text{He}$. V prvi etapi nastaja ${}^8_4\text{Be}$, ki pa skoraj takoj nato razpade nazaj v dve helijevi jedri.



Če v procesu nastaja dovolj berilija, lahko kljub kratkemu življenjskemu času berilija pride do reakcije med berilijem in helijem. Nastane jedro ogljika:

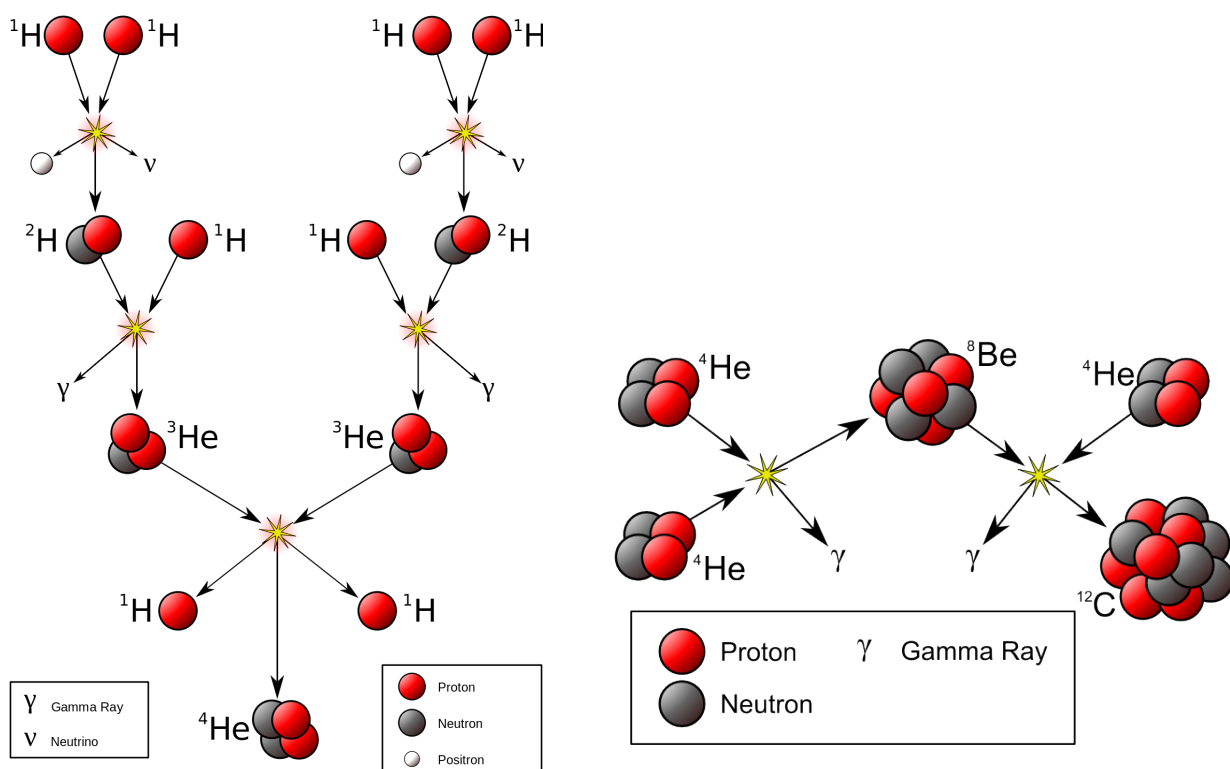


Če so temperature dovolj visoke, lahko v naslednjem koraku nastane kisik:



Na ta način v težkih zvezdah nastajajo novi elementi, vse dokler je vezavna energija nastalega jedra večja od vezavnih energij jeder, ki vstopajo v reakcijo. Za produkte je značilno, da je A večkratnik 4 in Z večkratnik 2. Ustavi se pri niklju ${}^{56}_{28}\text{Ni}$, ki razpade v železo ${}^{56}_{26}\text{Fe}$, najmočnejše vezano jedro.

Masivne zvezde, ki dosežejo to etapo, ne morejo več uravnovesiti gravitacijskega tlaka. Dokler je potekal proces zlivanja elementov, je sproščena energija zagotavljala dovolj visoko temperaturo in tlak, ki je uravnovesil gravitacijski tlak. Ko pa zlivanje preneha, se zvezda krči naprej. Nekaj časa lahko tlak vzdržuje Fermijev plin elektronov, a ko se elektroni začno spajati s protoni v nevtrone, $e + p \rightarrow n + \nu$, ni več mehanizma, ki bi preprečil zvezdin kolaps. Zvezda se sesuje sama vase, takoj nato pa eksplodira kot supernova. V središču zvezde ostane nevtronska zvezda ali črna luknja. V procesu nastaja velik presežek nevtronov, ki se absorbirajo v jedrih, nastalih



Slika 33: Na levi: reakcija zlivanja vodika v helij kot poteka na Soncu. V prvi etapi nastaja devterij, ki se nato s protonom zliva v jedro ${}^3_2\text{He}$. Tu naraste temperatura že na sto milijonov kelvinov, tako da lahko poteče še zadnja reakcija, pri kateri se dve jedri ${}^3_2\text{He}$ zlijeta v jedro ${}^4_2\text{He}$, dva protona pa začneta cikel znova. Na desni: dve jedri ${}^4_2\text{He}$ se zlijeta v kratkoživ izotop ${}^8_4\text{Be}$, ki se s tretjim jedrom ${}^4_2\text{He}$ zlije v stabilni izotop ${}^{12}_6\text{C}$.
<http://en.wikipedia.org/wiki/File:FusionintheSun.svg>,
http://en.wikipedia.org/wiki/Triple-alpha_process

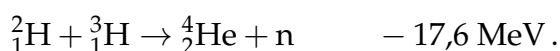
pri zlivanju. Na ta način pride do nastajanja težjih elementov od ${}^{56}_{26}\text{Fe}$ vse do urana. Večino nastalih elementov supernova izvrže in ti elementi sestavljajo medzvezdno snov, iz katere so nastali tudi planeti v našem osončju.

Kontrolirana fuzija. Za reakcijo zlivanja je torej potrebna zelo visoka temperatura, vsaj 15 milijonov kelvinov. Na Zemlji so prvič uspeli ustvariti reakcijo pri *vodikovi bombi*. Kot „vžigalnik“ so uporabili kar bombo, delujočo na principu jedrske fizije (razcepa). Pri vodikovi bombi je sproščena energija lahko znatno večja kot pri fizijskih bombah, kjer je omejena s količino goriva, ki jo je možno uporabiti. V času hladne vojne, ko sta velesili tekmovali, katera bo zgradila močnejšo bombo, je bilo to pač zelo pomembno.

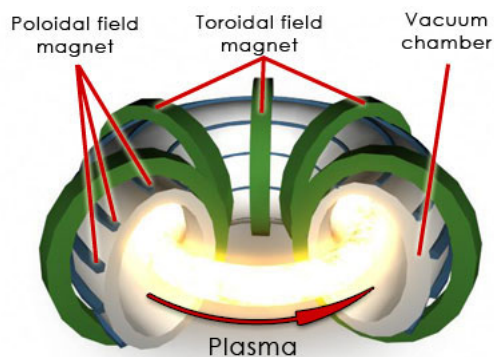
Poleg uporabe fuzije v vojaške namene so si znanstveniki prizadevali iznajti princip, s katerim bi lahko ustvarili *kontrolirano fuzijo*, ki bi predstavljala neizčrpen vir čiste in varne energije. Osnovni problem je, kako zadržati plazmo pri izredno visoki temperaturi v primerni posodi. Princip sta prva predlagal ruska fizika Igor Tamm in Andrej Saharov že leta 1950. Na podlagi njune zamisli so v Novosibirsku zgradili prvi reaktor,

imenovan TOKAMAK, s katerim so dosegli pogoje za kontrolirano fuzijo. Princip tega reaktorja so kasneje prevzele tudi raziskovalne skupine v drugih državah. Danes razvoj teče naprej v okviru mednarodnega projekta, pri katerem sodeluje večina razvitih držav, saj so stroški razvoja izjemno visoki. V okviru projekta ITER v južni Franciji gradijo reaktor, ki bi pri kontrolirani fuziji oddal več energije, kot bi jo potreboval za delovanje.

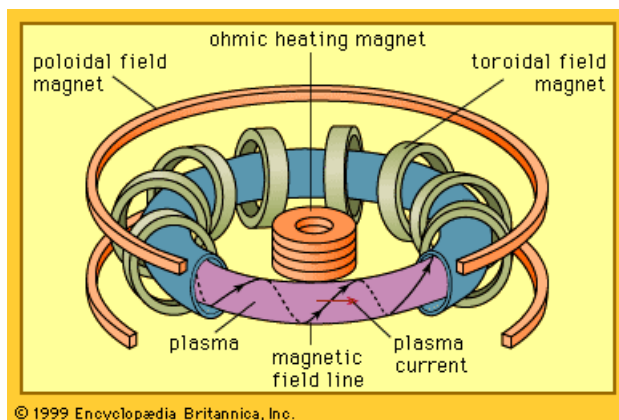
Princip reaktorja vrste TOKAMAK, kakršen je tudi reaktor, ki ga gradijo v okviru projekta ITER, kaže slika 34. Posoda, v kateri je plazma, ima obliko torusa (svitka). Dve vrsti magnetov ustvarjata toroidalno magnetno polje znotraj posode. V takšnem polju pozitivni in negativni ioni devterija in tricija krožijo znotraj svitka. Plazma pri visoki temperaturi tako ne pride v stik s stenami posode. Osnovna reakcija zlivanja ima obliko



Plazmo segrevajo indukcijski tokovi, ki jih ustvarja tretja vrsta magnetov. Zunanje segrevanje naj bi bilo potrebno le pri zagonu, dokler ne bi dosegli stacionarnega stanja; kasneje bi temperaturo plazme vzdrževala sama reakcija. Energijo iz plazme odnašajo nevtroni, ki nastajajo pri reakciji in se absorbirajo v stenah posode. Posodo hladi voda. Oddana energija naj bi se porabljala za poganjanje turbin, tako kot pri drugih termoelektrarnah. Reaktor sam proizvaja tritij pri reakciji nevtronov z litijem v plašču posode: $\text{n} + {}^6_3\text{Li} \rightarrow {}^4_2\text{He} + {}^3_1\text{H}$.



© 2005 HowStuffWorks



© 1999 Encyclopædia Britannica, Inc.

Slika 34: Principa delovanja reaktorja vrste TOKAMAK. Dve vrsti magnetov, *poloidal field magnet* in *toroidal field magnet* ustvarjata toroidalno magnetno polje (*magnetic field lines*), znotraj katerega se gibljejo ioni v plazmi. Tretja vrsta magnetnega polja (*ohmic heating magnets*) poskrbi za segrevanje plazme do delovne temperature, ki bo v reaktorju ITER merila 100 milijonov stopinj.

7 Delci

7.1 Klasifikacija delcev

Za opis zgradbe jeder sta zadoščala proton in nevtron; pri razpadih smo vključili še elektrone, pozitrone, nevtrine in antinevtrine. Od prej poznamo foton in iz opisov nekaterih dogodkov teoriji relativnosti težki elektron — mion. Pri trkih delcev bodisi v naravi bodisi v pospeševalnikih, pa se pojavljajo številni novi delci. Še pred izumom pospeševalnikov so lahko opazovali nove delce, ki prihajajo iz vesolja. Večinoma so to zelo hitri protoni, ki trkajo s protoni in jedri v vrhnjih plasteh atmosfere. Pri trkih se rojevajo delci, ki jih ni mogoče opaziti v običajni snovi. Značilen primer je proces, pri katerem nastajajo mioni:

$$p + n \rightarrow p + p + \pi^- \rightarrow p + p + \mu^- + \bar{\nu}_\mu.$$

Pri trku nastane nov delec, pion π^- , ki hitro razpade v mion in mionski nevtrino. V začetnem stanju sta dva fermiona, v končnem pa trije fermioni in še en antidelec z fermionskim številom -1 , torej je ohranitev fermionov zadoščeno. Pač pa vmesni delec, pion, ne more biti fermion, lahko pa je bozon, saj za bozone ohranitveno število ne velja. Od bozonov smo do sedaj poznali le foton; pion je drug primer. V nasprotju s fotonom ima končno mirovno maso, $m_\pi c^2 = 139,6 \text{ MeV}$. Pion je lahko pozitivno ali negativno nabit ali nevtralen.

Danes nove delce ustvarjamo in proučujemo v velikih pospeševalnikih. Pri trkih protonov s protoni in jedri se lahko zgodi, da namesto protona in nevtrona dobimo druge delce, na primer

$$p + p \rightarrow p + \Delta^+ \rightarrow p + n + \pi^+.$$

V tem primeru smo pri trku dobili kratkoživo vzbujeno stanje protona, delec delta, ki razpade bodisi v proton in nevtralni pion bodisi nevtron in pozitivno nabit pion. Drug zgled je proces

$$p + p \rightarrow p + \Lambda + K^+,$$

pri katerem nastane dolgoživ delec lambda, ki je fermion, nekoliko težji od protona, in kaon K^+ ki je bozon, podoben pionu, le s precej večjo maso, $m_K c^2 = 494 \text{ MeV}$.

Značilen proces je tudi rojstvo delca in njegovega antidelca:

$$p + p \rightarrow p + p + \Omega^- + \overline{\Omega^-}.$$

Množico delcev, ki nastanejo pri takšnih trkih, razvrstimo v tri velike skupine:

- **leptoni** ali lahki delci. Sem sodijo elektron, mion, nevtrino in mionski nevtrino in njihovi antidelci. So *fermioni* in vsi imajo spin $\frac{1}{2}$.
- **mezoni** ali srednje težki delci. Omenimo pion, kaon, mezone $\eta, \rho, \omega \dots$. So *bozoni* in imajo spin $S = 0$ ali $S = 1$. Nekateri od njih so sami sebi antidelec, na primer nevtralni pion π^0 , antidelec od π^+ pa je π^- .
- **barioni** ali težki delci. Poleg protona in nevtrona sodijo sem delci Δ, Λ , in še $\Sigma, \Xi, \Omega \dots$. Delci so vsi težji od protona, vsi so fermion, spin je lahko $S = \frac{1}{2}$ ali $S = \frac{3}{2}$ ($\Delta, \Omega \dots$)

7.2 Interakcije

V naravi delujejo med telesi sile; bolj splošno govorimo o *interakcijah*. Pojem zajema tudi primere, ko pri trkih nastajajo novi delci, ali ko delca pri trku spremenita identiteto (na primer pri razpadu beta se proton spremeni v nevtron). V relativistični kvantni teoriji interakcijo med dvema delcema opišemo kot izmenjavo tretjega delca. Tretji delec je posrednik interakcije; posrednik elektromagnetne interakcije je na primer foton. V splošnem so posredniki interakcije bozoni. Tako kot govorimo o dualizmu pri obnašanju delca, ki se pri določenih pojavih kaže kot delec, pri drugih pa kot valovanje, obstaja dualizem tudi pri opisu interakcij: opisujemo jih lahko s polji ali z izmenjavo bozonov.

V naravi poznamo naslednje štiri interakcije

- **gravitacijska** interakcija je pomembna v makroskopskem svetu, v mikroskopskem svetu jo lahko zanemarimo; posrednik interakcije je brezmasni *graviton*;
- **elektromagnetna** interakcija je pomembna tako v makroskopskem kot v mikroskopskem svetu; posrednik je foton;
- **šibka** interakcija deluje le na zelo kratkih razdaljah in je odgovorna za razpad beta in še za nekatere druge procese; posredniki so šibki bozoni W^+ , W^- in Z z masami, ki so za faktor 90 večje od mase protona. Weinberg in Salam sta neodvisno pokazala, da sta elektromagnetna in šibka interakcija ena sama interakcija — *elektro-šibka interakcija*. Elektromagnetna je njena manifestacija na večjih razdaljah, šibka pa na zelo kratkih razdaljah (0,001 fm).
- **močna** interakcija se manifestira na kratkih razdaljah kot privlačna sila med nukleonoma, a – kot bomo spoznali v nadaljevanju – tudi kot sila, ki deluje med gradniki, ki sestavljajo mezone in barione; nosilci interakcije so brezmasni *gluoni*. Močno interakcijo bomo bolj podrobno opisali v nadaljevanju.

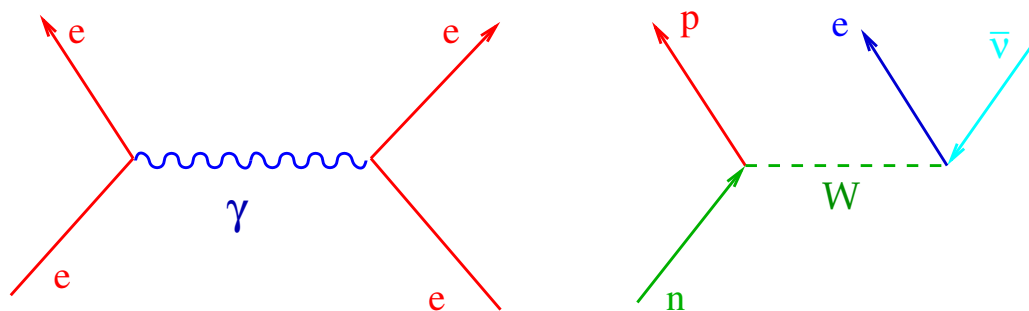
Gravitacijsko interakcijo čutijo vsi delci; jakost je odvisna od polne energije delca.

Elektro-šibko interakcijo čutijo vsi nabiti delci, poleg njih pa tudi nevtrini.

Močno interakcijo čutijo le mezoni in barioni, leptoni pa ne.

7.3 Zgradba mezonov in barionov

Nukleoni so sestavljeni delci. Veliko lastnosti nukleonov kaže, da gre za delce z notranjo strukturo. Končna velikost, $r \approx 0,7$ fm, je že takšna indikacija. Pri obravnavi vrtilne količine jedra smo omenili magnetni moment protona, ki je za faktor 2,79 večji, kot bi pričakovali na podlagi primerjave z elektronovim magnetnim momentom ($g_p = 5,58$ namesto $g_s = 2$). Še bolj nenavadno je dejstvo, da ima magnetni moment tudi nevtron, saj je nevtralen delec ($g_n = -3,82$). Tako velike magnetne momente lahko pojasnimo le tako, da predpostavimo, da imata nukleona majhno jedro, okoli katerega kroži nabit delec, ki zaradi svoje tirne vrtilne količine ojača oziroma ustvari magnetni moment. V primeru nevtrona bi bil naboj nukleonovega jedra pozitiven, krožeči delec pa bi imel negativni naboj, tako bi zagotovili, da je nevtron kot celota nevtralen,



Slika 35: Leva slika: elektron (ali pozitron) emitira foton, ki ga drugi elektron (pozitron) absorbira in ponovno emitira proti prvemu. Tako si delca izmenjujeta foton. Fotona ne moremo opaziti, saj se ves čas giblje le med delcema. Takšnemu fotonu pravimo *virtualni* (navidezni) foton. Desna slika: nevtron odda negativno nabit bozon W in se pri tem spremeni v proton. Bozon se anihilira in pri tem rodi par elektron antinevtrino. Pri tem prepotuje nepredstavljivo kratko razdaljo velikostnega reda 0,001 fm.

a da ima kljub temu od nič različen magnetni moment. Tudi obstoj vzbujenih stanj nukleonov kaže na to, da gre za sestavljene delce.

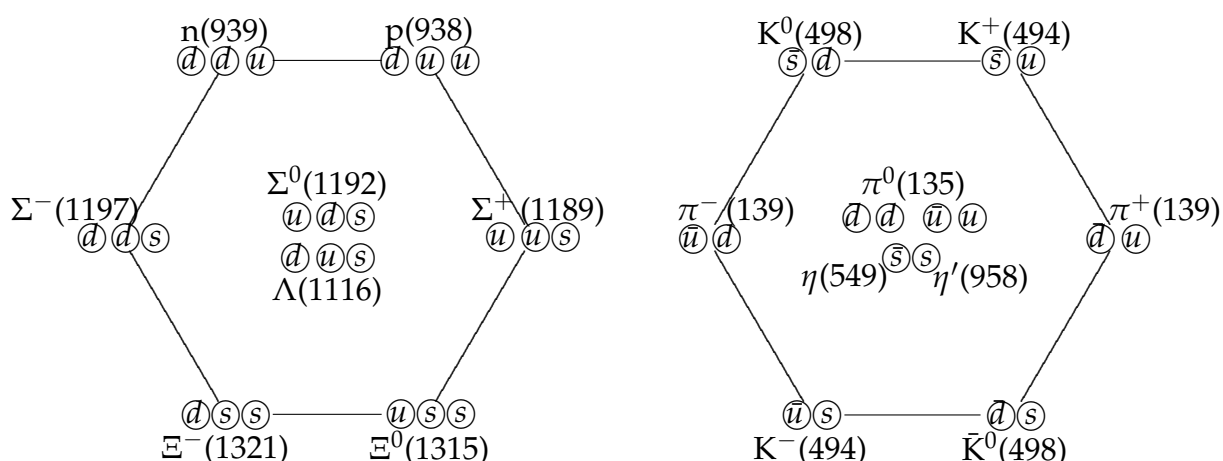
Multiplieti barionov in mezonov. Pri razumevanju strukture atomov nam je bil v veliko pomoč periodni sistem elementov. Tudi pri delcih lahko mezone in barione razvrstimo v skupine s podobnimi lastnostmi. Govorimo o *multiplletih*. Najlažje mezone s spinom 0 in barione s spinom $\frac{1}{2}$ tako razvrstimo v strukture po osem delcev — *oktete*. Na podlagi multiplletov je Gell-Mann skupaj s Zweigom leta 1964 uspel napovedati sestavo mezonov in barionov in predvsem lastnosti interakcije med njihovimi gradniki. Gradnike je imenoval *kvarke*. Kvarke so fermioni. Predlagal je, da so mezoni sestavljeni iz kvarka in antikvarka, kar zagotovi, da je njihovo fermionsko število 0, barioni pa iz treh kvarkov. Vsi kvarke imajo spin $\frac{1}{2}$, razlikujejo pa se po električnem naboju in še nekaterih drugih lastnostih.

Zgradba nukleona. Proton in nevtron sta sestavljena iz dveh vrst kvarkov, kvarka u in kvarka d. Kvark u ima naboj $\frac{2}{3}e_0$, kvark d pa $-\frac{1}{3}e_0$. Od tod lahko hitro ugotovimo, da proton sestavljata dva kvarka u in en kvark d; nevtron pa dva kvarka d in en kvark u. Pri nekoliko težjih barionih se pojavi nov kvark, *čudni* kvark, ki ga označimo z s.

Mezoni. Najlažje mezone, pione, sestavljajo pari kvarka in antikvarka u in d; pion π^+ tako sestavljata kvark u in antikvark $\bar{d}$, π^0 sestavlja linearna kombinacija kvarkov $u\bar{u}$ in $d\bar{d}$. Druge kombinacije lahko razberemo iz slike 36.

Novo kvantno število – barva. Kvarke imajo spin $\frac{1}{2}$, torej jih je mogoče sklopiti v skupno vrtilno količino (spin) $\frac{3}{2}$. Ta nas pripelje do drugega multiplleta barionov, ki so prav tako sestavljeni iz kvarkov u, d in s (slika 37).

Tu pa naletimo na težavo. Če pogledamo najtežji barion, Ω^- , vidimo, da ga sestavljajo trije kvarke s. V osnovnem stanju so vsi na najnižji orbitali; ker ima delec spin



Slika 36: Levo: oktet barionov s spinom $1/2$. V oklepaju so mirovne energije v MeV. Desno: oktet mezonov s spinom 0 . Ena od kombinacij parov kvark-antikvark ne pripada oktetu (η').

$3/2$, zavzamejo komponente spine v smeri osi z vrednosti $\pm 3/2$ in $\pm 1/2$. V prvem primeru so vsi trije spini usmerjeni v isto smer; v drugem primeru dva. V obeh primerih kršimo izključitveno načelo, saj sta vsaj dva delca v istem stanju. Problem razrešimo tako, da vpeljemo novo kvantno število, ki razlikuje med temi stanji. Novo kvantno število mora zavzeti (vsaj) tri različne vrednosti. Slikovito ga imenujemo *barva*; vrednosti, ki jih lahko zavzame, pa rdeča (r), zelena (g) in modra (m). Vsako od teh števil (barv) ima tudi antibarvo, ($\bar{r}$, $\bar{g}$, $\bar{b}$), ki jo pripišemo antikvarkom. Barioni so sestavljeni tako, da je en kvark rdeč, drugi zelen in tretji moder.

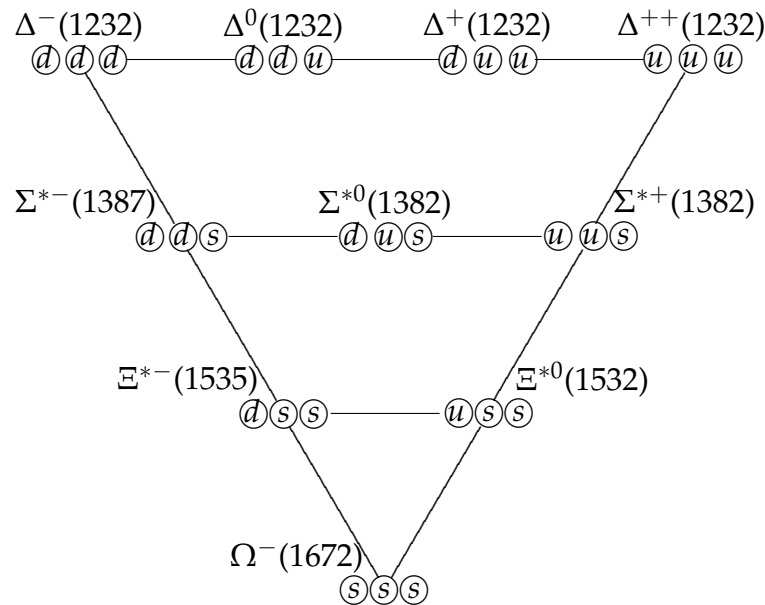
7.4 Močna interakcija

Močna interakcija, ki smo jo omenili v prejšnjem poglavju, se manifestira kot osnovna interakcija med kvarki. Lastnosti interakcije so zelo komplicirane; do neke mere si lahko pomagamo z analogijo z elektromagnetno interakcijo.

Pri EM interakciji ima električni naboj dvojno vlogo; je izvir polja, hkrati po tudi količina, preko katere delec „zazna“ silo zaradi prisotnosti polja (drugega delca). Velikost sile zapišemo kot $F_{12} = e_1 E_2 = e_1 e_2 / 4\pi\epsilon_0 r^2$; naboja v končnem izrazu nastopata simetrično, saj je rezultat neodvisen od tega, če gledamo silo na drugi delec v polju prvega ali obratno. Električni naboj je le ene same vrste, a lahko zavzame pozitivno ali negativno vrednost. Pri močni sili električnemu naboju ustreza barvni naboj, ki pa ima zaradi treh vrst barv bolj komplicirano strukturo.

Gluoni. Posredniki interakcije so brezmasni *gluoni*: kvark pri interakciji z drugim kvarkom odda gluon, ki ga drugi kvark absorbira. Kvark pri tem lahko spremeni barvo, kar predstavlja dodatno težavo pri opisu sile. Pri majhnih razdaljah ima močna sila enako obliko kot elektromagnetna

$$F_{12} = \lambda_1 \lambda_2 \frac{\alpha}{r^2}.$$



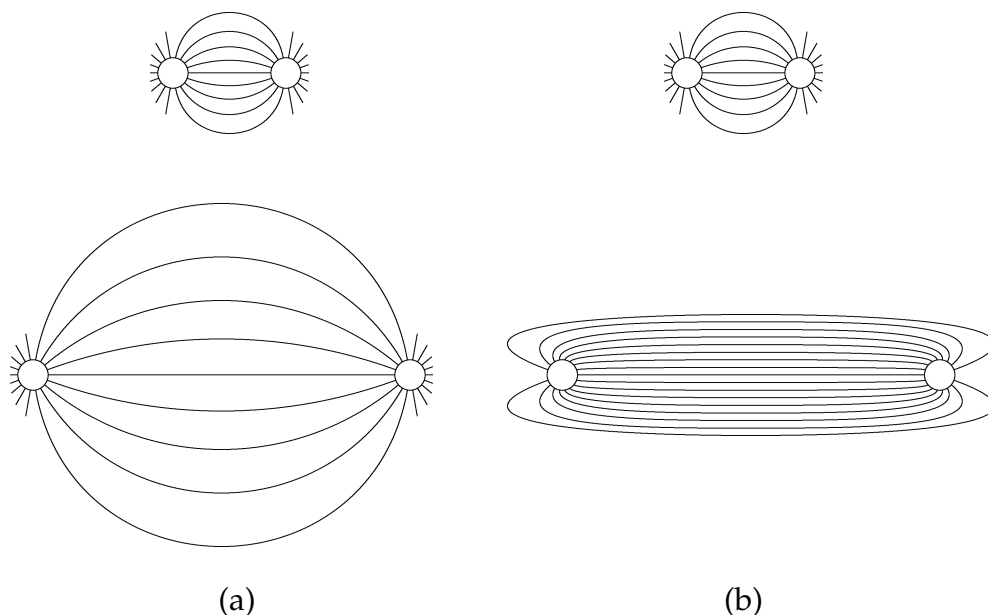
Slika 37: Dekuplet barionov s spinom 3/2.

Količino λ , ki sedaj igra vlogo naboja, predstavimo z matriko 3 krat 3. Diagonalni elementi ustrezajo procesom, pri katerih se ohranja barva kvarka, izven diagonalni pa tistim, pri katerih se barva spremeni. Obliko matrik diktira simetrija. Vseh linearno neodvisnih matrik je sicer 9, a enotska matrika ne more ustrezati naboju, ki bi posredoval interakcijo. Imamo torej osem različnih nabojev in prav toliko različnih gluonov. Količina α je jakost močne interakcije in ustreza količini $1/4\pi\epsilon_0$ pri elektromagnetni sili.

Sila med kvarkom in antikvarkom. Oblika sile je enostavna, če gledamo silo med kvarkom in antikvarkom v mezonu. V tem primeru je produkt nabojev kar -1 in na dovolj majhnih razdaljah dobimo

$$F_{q\bar{q}} = -\frac{\alpha}{r^2}.$$

Kaj se zgodi, ko razdaljo povečamo? Najlažje dogajanje ilustriramo na sliki, ki prikazuje primerjavo med silnicami pri elektrostatski in pri močni sili (slika 38). Če razdaljo med dvema električno nabitima delcema – na primer med elektronom in pozitronom – povečujemo, se silnice med njima razmikajo, saj je število silnic ostaja konstantno. Sila zato z razdaljo pojema. Pri gluonskem polju pa silnice nosijo barvni naboj, torej interagirajo med seboj. Med silnicami se pojavi sila. Izkaže se, da je sila privlačna, podobno kot pri dveh vzporednih vodnikih, po katerih tečeta električna tokova v isto smer. Zaradi tega se silnice ne razbežijo po prostoru, temveč ostanejo znotraj nekakšne cevi (glej sliko 38). Silnice med kvarkom in antikvarkom (pa tudi med dvema kvarkoma) imajo takšno obliko kot silnice v kondenzatorju. Ker je polje konstantno, je tudi sila konstantna in se z razdaljo sploh ne spreminja. Konstantni sili ustreza potencial, ki narašča z razdaljo med kvarkoma in gre (formalno) proti neskončnosti, ko gre $r \rightarrow \infty$.



Slika 38: Silnice na majhnih in velikih razdaljah (a) med elektronom in pozitronom, (b) med kvarkom in antikvarkom

Sile med barioni in mezoni. Neskončen potencial v neskončnosti interpretiramo tako, da bi morali paru kvarka in antikvarka dovesti neskončno veliko energijo, če bi želeli dobiti prost kvark in prost antikvark. Enako velja za druge kombinacije parov kvarkov: prostih kvarkov zato v naravi ni. Kako pa je potem možno, da se tak potencial ne manifestira v primeru dveh barionov, dveh mezonov, ali bariona in mezona? Razlog je v tem, da so vsi ti delci *barvno nevtralni* in v tem primeru simetrija močne interakcije zagotavlja, da se sile med kvarki v različnih barvno nevtralnih barionih in mezonih med seboj izničijo.

To ni čisto res v primeru, ko se dva bariona približata na majhno razdaljo. Tedaj se sile paroma ne okrajšajo popolnoma, ostane nekaj tako imenovane *residualne* interakcije. Ta postane močno privlačna, ko se nukleona dotikata. Nukleona pa se ne moreta prekriti, saj bi v tem primeru po dva kvarka zasedla isto stanje, kar je v nasprotju z izključitvenim načelom. Na zelo kratkih razdaljah postane sila med nukleonoma odbojna kot posledica izključitvenega načela. Na ta način pojasnimo jedrsko silo med nukleoni, predvsem njen kratek doseg in veliko jakost na manjših razdaljah. Nekaj podobnega obstaja tudi pri nevtralnih atomih; ko se atoma močno približata, se pojavi privlačna sila.

7.5 Mase kvarkov in nukleonov

V tabeli so zbrane nekatere lastnosti znanih kvarkov. Kvarki so razporejeni v generacije; v vsaki sta dva kvarka, eden z nabojem $-e_0/3$ in drugi z $2e_0/3$. Obstajajo prepričljivi dokazi, da druge generacije ne obstajajo in je tabela kvarkov kompletna.

Opazimo velik razpon mas, od mas blizu elektronove mase do mase, ki je več kot stokrat večja od mase protona.

oznaka	ime (okus)	naboj	mirovna energija	življenjski čas
d	{ lahka kvarka	$-e_0/3$	4,8 MeV	(stabilen)
u		$2e_0/3$	2,3 MeV	(stabilen)
s	čudni	$-e_0/3$	95 MeV	$\sim 10^{-10}$ s
c	čarobni	$2e_0/3$	1,275 GeV	$\sim 10^{-12}$ s
b	spodnji	$-e_0/3$	4,5 GeV	$\sim 10^{-12}$ s
t	zgornji	$2e_0/3$	173 GeV	
antikvariki: $\bar{u}, \bar{d}, \bar{c}, \bar{s}, \bar{b}, \bar{t}$				

Tabela 2: Kvarki

Masa nukleona. Kar v tabeli najbolj preseneča, sta majhni masi kvarkov u in d, ki sestavljata proton in nevtron. V višjih nadstropjih narave velja, da je masa sestavljenega delca, recimo vodikovega atoma ali helijevega jedra, v prvem približku kar enaka vsoti mas gradnikov. V prvem primeru je to kar vsota mas protona in elektrona, v drugem vsota mas dveh protonov in dveh nevtronov. Popravek je vezavna energija, ki maso (mirovno energijo) malo zmanjša. Pričakovali bi torej, da sta masi kvarkov u in d nekako med 310 MeV in 330 MeV, v resnici pa sta približno sto krat manjši.

Da bi razumeli, kako je to mogoče, ocenimo energijo protona v najbolj preprostem modelu. Vzemimo, da se kvarki gibljejo v povprečnem potencialu, ki ima obliko krogele jame s polmerom, primerljivim s polmerom protona $r_p \approx 0,75$ fm. Iz načela nedoločenosti najprej ocenimo kinetično energijo posameznega kvarka v jami. Gibalno količino ocenimo kot pri vodikovem atomu:

$$p = \sigma_p = \frac{\hbar}{r} \approx 260 \text{ MeV}/c.$$

Tu smo za nedoločenost lege vzeli kar polmer jame. Pri računanju kinetične energije ne smemo računati nerelativistično, temveč uporabimo relativistično enačbo za polno energijo, od katere odštejemo mirovno energijo kvarka:

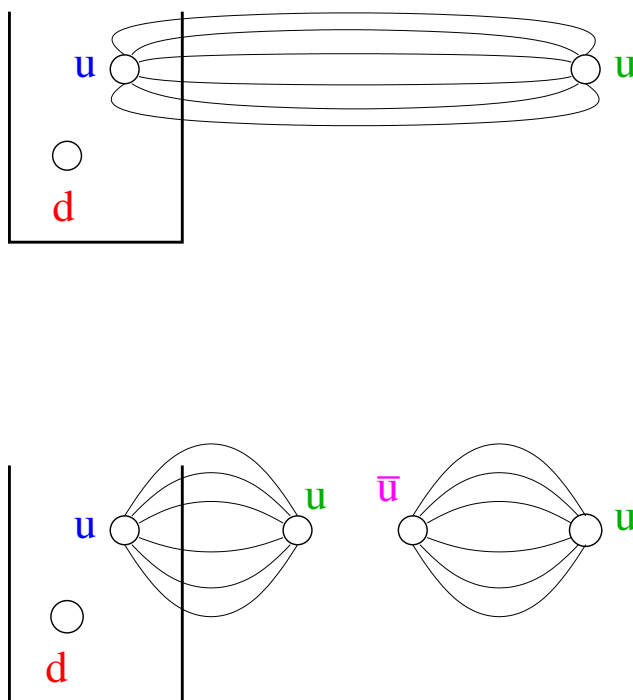
$$W_{\text{kin}} = \sqrt{p^2 c^2 + m_q^2 c^4} - m_q c^2.$$

Ker je $pc \gg m_q c^2$, lahko mirovni masi v obeh členih zanemarimo in dobimo preprosto (ultra relativistično) oceno

$$W_{\text{kin}} = pc \approx 260 \text{ MeV}$$

za kinetično energijo enega kvarka. Kinetična energija treh kvarkov torej meri ~ 780 MeV, kar je že zelo blizu mirovni energiji protona 938 MeV. Razlika gre na račun interakcije z drugimi polji. Večina mirovne energije protona je torej posledica kinetične energije kvarkov. Rezultat je zanimiv; ker je masa makroskopske snovi praktično vsota mas nukleonov, ki snov sestavljajo, lahko rečemo, da gre večji del mase makroskopskih objektov (in tudi naše mase) na račun zelo hitrega gibanja kvarkov v nukleonu. V nukleonu se torej kinetična energija kvarkov spreminja v mirovno energijo nukleona.

Stabilnost protona. Zakaj proton ne razpade, če je njegova mirovna energija znatno večja od mirovne energije kvarkov, ki ga sestavljajo? Razlog je v neobičajni obliki sile (potenciala) med kvarki. Če hočemo enega od kvarkov iztrgati iz nukleona, se med njim in preostalimi kvarki pojavi sila, ki jo lahko ponazorimo s silnicami, prikazanimi na sliki 38 desno spodaj. Sila je kar konstantna, potencialna energija pa narašča linearno z razdaljo. Silnice se pri tem lahko pretrgajo. Na mestu, kjer se pretrgajo, se rodi par kvark antikvark (glej sliko 39). Nastali kvark ostane v protonu, antikvark pa se z odhajajočim kvarkom veže v mezon, ki zapusti proton. Proton torej ne razpade na posamezne kvarke, temveč na proton (ali nevtron) in mezon; seveda mu moramo pri tem dovesti dovolj energije. Pri trkih protonov pri zelo visokih energijah opisani pojav



Slika 39: Pri trku protona s tarčo odleti eden od u kvarkov iz protona. Vez z ostalimi kvarki se pretrga in rodi se par kvark-antikvark. Antikvark ($\bar{u}$) skupaj s kvarkom u tvori pion π^0 , ki ni več vezan na proton in prosto odleti proč.

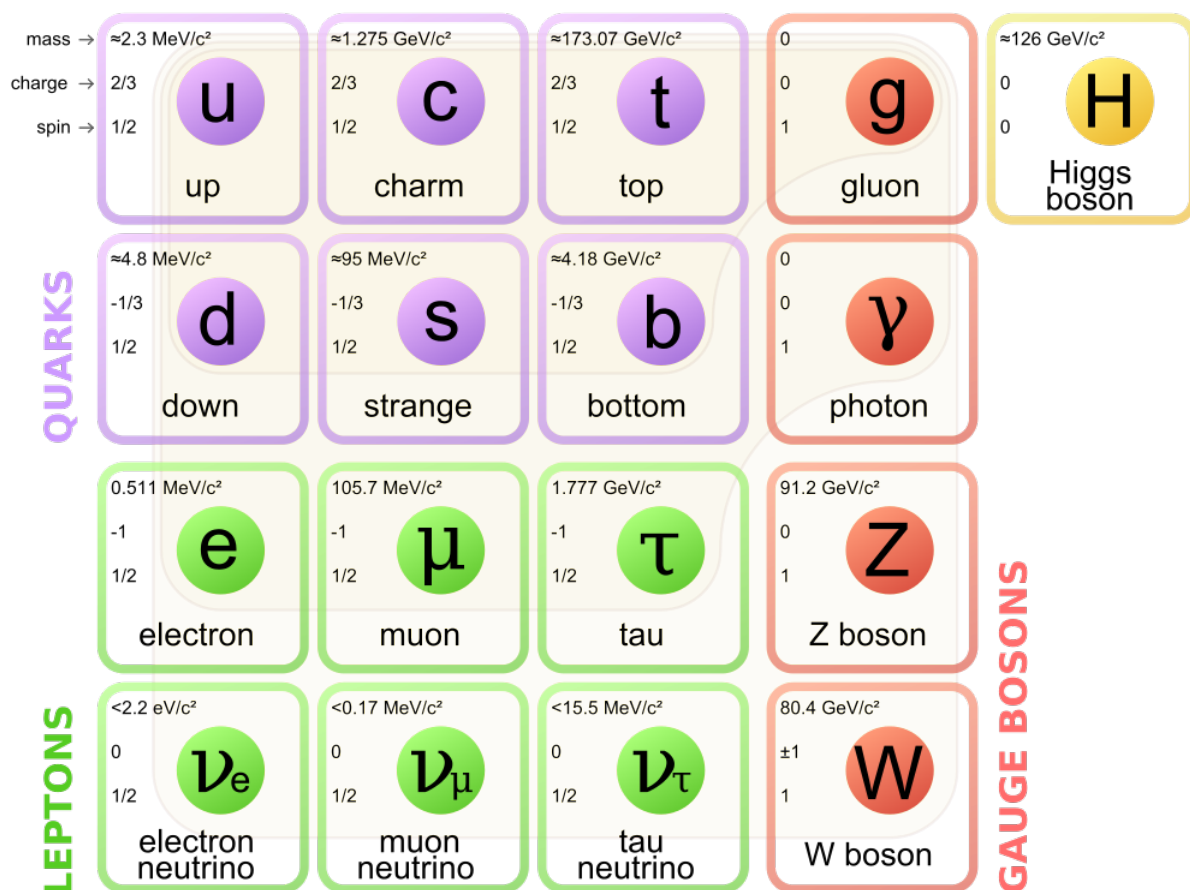
lahko celo opazimo. Energija je tedaj tako velika, da odhajajoči kvark prepotuje znatno razdaljo. Ko se silnice pretrgajo, je na razpolago ogromno energije, tako da ne nastane le en sam mezon temveč cel *pljusk* (angl. *jet*) odhajajočih mezonov in drugih delcev, ki se gibljejo v smeri pobeglega kvarka, kar lahko opazimo v detektorjih.

Proton bi lahko razpadel v pozitron⁷, najlažji pozitivno nabiti delec v naravi. Razpad skušajo izslediti v velikih detektorjih; za enkrat lahko le podajo oceno, da je razpolovni čas protona daljši od 10^{34} let.

⁷Pojem delca in antidelca je določen posebej med leptoni in posebej med barioni, med leptoni in barioni pa ni definiran. Zato lahko proton, ki je med barioni delec, razpade v leptonski antidelec.

7.6 Standardni model

V tako imenovanem *standardnem modelu delcev in interakcij* so zbrani vsi znani delci in vse znane interakcije. Obstajajo zelo močni argumenti, da drugih osnovnih delcev v naravi ni.



Slika 40: Standardni model delcev in sil.

http://en.wikipedia.org/wiki/File:Standard_Model_of_Elementary_Particles.svg.

Kvarki in leptoni. Kvarki in leptoni so razporejeni v generacije. V tabeli je prva generacija v prvem stolpcu (pri kvarkih v tabeli 7.5 smo generacije kvarkov zapisali po vrsticah). Prva generacija vsebuje dva lahka kvarka, gradnika nukleonov, in dva leptona, elektron in elektronski nevtrino. S prvimi tremi delci pojasnimo strukturo in lastnosti snovi, nevtrino se pojavlja pri razpadih beta. Druga generacija delcev je v drugem stolpcu. Vsi delci v isti vrstici imajo enak spin in naboj. Gradniki v drugi in tretji generaciji so veliko težji od delcev prve generacije in niso obstojni. Pojavljajo se le pri visoko energijskih procesih v vesolju ali pospeševalnih na Zemlji. Glede mas so izjema nevtrini, za katere še niso prepričani, če so zares brezmasni delci.

Bozoni. V četrtem stolpcu so bozoni, posredniki interakcije med delci. Gluoni posredujejo močno silo med kvarki; med drugimi delci ne delujejo. Pač pa delujejo s silo tudi med seboj. Foton posreduje elektromagnetno interakcijo med delci. Deluje med vsemi nabitimi delci, izjema so torej le nevtrini. Bozoni Z , W^+ in W^- posredujejo šibko interakcijo med vsemi delci. Omogočajo spremembo identitete kvarkov (u se lahko spremeni v d, s se spremeni v u, t v c in podobno) in leptonov. Pri vseh procesih se ohranja posebej število kvarkov (antikvarke štejemo z -1) in posebej število leptonov. Za primer navedimo možni razpad čarobnega kvarka in možni razpad težkega leptona

$$c \rightarrow d + \mu^+ + \nu_\mu, \quad \tau^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\tau.$$

Higgs. Kot poseben delec se pojavi še Higgsov bozon. Ima prav posebno vlogo in sicer da delcem in šibkim bozonom maso. Vakuum ni prazen prostor, temveč ga napolnjujejo Higgsovi delci. Namesto o delcih lahko govorimo o Higgsovem potencialnem polju. Ob nastanku vesolja v velikem poku so bili vsi delci brezmasni in so se seveda gibal s svetlobno hitrostjo. Ko je temperatura vesolja dovolj padla, se je pojavilo Higgsovo polje, kot nekakšen kondenzat Higgsovih delcev. Zaradi privlačne interakcije med Higgsovimi delci ima takšno stanje *nižjo* energijo, kot bi jo imel prostor brez Higgsovih delcev. Zaradi gibanja skozi potencialno polje se je hitrost delcem zmanjšala, nekaterim manj, drugim bolj. Učinek je enak, kot če bi imeli delci maso (mirovno energijo). Lahko rečemo, da Higgsovo polje iz potencialne energije delca generira mirovno energijo delca, torej energijo, ki je ni moč spremeniti v kinetično energijo. Kako pa sploh vemo, da so prvotni delci brezmasni? Enačbe, ki opisujejo dinamiko delcev in polj, imajo simetrijo, ki ustreza brezmasnim delcem. Simetrija se manifestira v številnih procesih, in edini mehanizem, ki zagotavlja ohranitev simetrije, je predpostavka o Higgsovem polju, ki generira mase z mehanizmom, opisanim v prejšnjem razdelku. Takšen mehanizem je že leta 1964 neodvisno predlagalo več fizikov, a obdržalo se je Higgsovo ime. Sta pa Nobelovo nagrado v 2013 za napoved bozona prejela Peter Higgs in François Englert.