ATOMY

Studijní text FO pro řešitele FO a ostatní zájemce o fyziku

Martin Kapoun

Obsah

Úvod

A tak anděl v jednom okamžiku může býti na jednom místě a v jiném mžiku na jiném místě, aniž by byl nějaký čas prostřední.

Tomáš Akvinský

Spolu s řeckým slovem *atom* přijaly evropské jazyky do své výbavy i zvláštní, totiž varovné, pojetí tohoto tak významného pojmu: zatímco slova „barva", „hláska", „tón" či „tvar", jež bychom přeneseně mohli vnímat jako jména pro atomy jednotlivých živlů, jsou svébytná, neodvozená popřením, nese v sobě slovo atom ($\alpha\tau o\mu o\zeta$ – ne-dělitelný) cosi z obavy o ztrátu identity, ono ochranné „Thus far and no further". Podobně zavádí vajšéšika, indická přírodní filozofie, koncept *anu*, nerozbitných a tedy věčných částic, z nichž jsou tvořeny nejen živly, ale i prostor, čas, mysl a duše.

Obecně bychom mohli atom definovat jako nejmenší možnou strukturu utvořenou a spočívající v rovnováze mezi pohybem konkrétních částic strukturu tvořících a interakcí těchto částic. Další rozdělení této struktury představuje již přechod k jiné škále sil a jiné povaze částic, které se podílejí na struktuře nové, menší. Nás přitom bude zajímat atom tvořený (jak se později ukázalo) protony a elektrony, jehož soudržnost zajišťují elektrostatické coulombické síly, tedy atom v 19. století vzkříšený chemií. Není bez zajímavosti, kdo se to vlastně atomu ujal: *al-khém(e)ia* je arabštinou přejaté slovo pro „umění transmutovat kovy", tedy umění sestupu do struktur řádově hlubších, jaderných.

1 Řecký atom

I je třeba předkládat ty nejmenší a nesložené věci za mezné části, které slouží jako prvotní jednotky za míru velikosti větších i menších atomů při rozumovém zření těchto neviditelných tělísek.

Epikúros

V období kolem poloviny tisíciletí před Kristem se v dějinách lidstva stalo cosi pozoruhodného a obtížně vysvětlitelného: jakýmsi tajemným procesem se v Číně, Indii, Persii i v Evropě téměř současně objevili hlubocí myslitelé a s nimi otázky přesahující všední život. Jednou z nich je i otázka po podstatě fyzického bytí. V evropském kulturním okruhu se k ní nejhlouběji vyslovili řečtí atomisté Démokritos a Leukippos, oba 5. až 4. stol. př. Kr. Myšlenky ústředního díla *Veliké uspořádání světa* uveďme dvěma odstavci, jak je zmiňují pozdější komentáře:

„Démokritovo učení bylo toto: Počátky všeho jsou atomy a prázdno . . . Světů je neomezené množství, vznikají a zanikají. Nic nevzniká z ničeho a nezaniká v nic. Atomy jsou neomezené co do velikosti a co do počtu, jsou unášeny ve vesmíru vířivým pohybem a takto vytvářejí všechny složeniny, oheň, vodu, vzduch i zemi, neboť i tyto živly jsou spojením určitých atomů. Atomy jsou neporušitelné a neměnné pro svoji tvrdost."

Díogenés Laertios

„Atomy narážejí na sebe, tím se spojují a z toho vzniká vše to, co vidíme. A o tomto pohybu atomů je třeba soudit, že neměl počátek, nýbrž že je od věčnosti."

Cicero

Pozoruhodné jsou zmínky o Démokritově pohledu na velikost atomu: *„Démokritos učil, že je možné, aby atom měl velikost světa."*

Aetios

„. . . lišili se v tom [Epikúros a Démokritos]*, že jeden pokládal všechny atomy za zcela malé, a proto nevnímatelné, kdežto druhý, Démokritos, myslil, že některé jsou velmi velké."*

Dionýsos z Alexandrie

Hloubku myšlenkového zázemí atomistů naznačuje Aristotelův postřeh (ve spise O obloze), jímž narušuje vžitý názor, že Démokritos byl výhradně materialistickým filozofem:

„Neboť i oni [Leukippos a Démokritos] *pokládají vše jsoucí v jistém smyslu za čísla a odvozují je z čísel . . . "*

Na Démokritův vřelý vztah k pýthagorejcům si vzpomeňte, až budete číst de Broglieovy úvahy nad myšlenkou částicových vln.

Druhý pól úvah o konečnosti možného dělení jsoucna představuje čínský koncept *čchi*, všeprostupující energie, která vesmírem proudí ve zvláštních rytmech střídání dvou principů *jin* a *jang* a která hmotě propůjčuje především vlastnost jemnosti a nekonečného zředění.

Někde zde by stál i Aristotelés ve 4. století př. Kr. Ten látku považoval za dělitelnou neomezeně a jeho autorita propůjčila spojitému náhledu na fyzickou stavbu věcí punc správnosti až do 19. století.

2 Atom 19. století

Natura non facit saltus

Atomistická hypotéza ovšem nezanikla, naopak v prostředí přírodovědy, která začínala podávat kvantitativní závěry, nalezla živnou půdu.

Ještě v 18. století popisuje D. Bernoulli (1738) vzduch v modelu *částic*, které se „neobyčejně rychle pohybují v různých směrech“, a daří se mu odvodit Boylův-Mariottův zákon. M. Lomonosov vytváří (1745 – 1747) mikroskopický popis plynu na základě hypotézy, že teplo je formou pohybu *stavebních částic tělesa*, avšak myšlenkové podhoubí částicové hypotézy lze vysledovat ještě hlouběji – když R. Hooke v 17. století vysvětloval stejnou symetrii krystalů bez ohledu na jejich velikost existencí drobných *částic* a jejich vrstevnatým uspořádáním.

Výrazný krok vpřed přineslo 19. století. V jeho prvních letech nejprve J. Dalton v podstatě postuloval existenci *atomů*, které jsou nezničitelné a nestvořitelné a které jsou při chemických reakcích spojovány a rozlučovány. Tím Dalton vytvořil jednoduchou a účinnou *kvantitativní* teorii chemických reakcí. Potíže teorie odstranil již r. 1811 Avogadro hypotézou o *molekulách* coby z nedělitelných atomů složených *základních částicích* všech látek. (A opět: vajšéšika dovoluje svým *anu* spojovat se v útvary – *dvianuka, trianuka* apod., *„které mohou být, např. v přítomnosti tepla, příčinou proměn“* – dnes vnímaných jako chemické.)

Také ve fyzice, do té doby dlouho pod vlivem makroskopického přístupu fenomenologické termodynamiky, jež strukturu látek ignorovala, se ve 2. polovině 19. století začíné prosazovat atomistická koncepce. R. 1857 podává R. Clausius novou *kinetickou* teorii plynů, v níž předpokládá existenci *molekul* přímočaře se pohybujících konstantní rychlostí. O tři roky později J. C. Maxwell vyvodil rozdělení rychlostí molekul, čímž odstranil někdejší zjednodušující předpoklady o stejné rychlosti všech molekul (srv. verše v Lucretiově básni *De rerum natura*, jež v 1. stol. př. Kr. názorně přibližuje myšlenky řeckého atomismu):

„Proto prostorem prázdným, jenž v klidu je, rychlostí stejnou musí se řítiti všechno, ač třeba je nestejné váhy“.

Za zmínku na tomto místě stojí moudré předjímání vztahu mezi neměnným atomem a rozmanitostí chování statistického souboru, jak je popisuje Galénos v komentáři k atomistům:

„Tak říkají [atomisté]*, že se žádný atom ani neotepluje, ani neochlazuje a týmž způsobem ani nevysychá, ani nevlhne a tím spíše se nestává ani bílým, ani černým, ani vůbec nepřijímá nějakou jinou vlastnost, ježto se nijak nemění.“*

Vzdor všem úspěchům *molekulárně-kinetické* teorie plynů je na obranu jejich odpůrců třeba zmínit důležitou poznámku: Výsledky se totiž nezmění, pokud hmotnost hypotetických částic zmenšíme a přitom adekvátně zvětšíme jejich počet, aby hmotnost soustavy zůstala zachována. V limitě nekonečně mnoha nekonečně lehkých částic přejdeme k Aristotelově představě spojitého rozložení hmoty.

O završení teorie se svými pracemi z let 1868 – 1871 zasloužil L. Boltzmann, nicméně rozhodující důkaz poskytl až roku 1908 J. B. Perrin při analýze Brownova pohybu pylových zrnek. Perrin totiž jako první obrátil sled úvah: částicová skladba látky mu byla *důsledkem* pozorovaného jevu. Když vlijeme kbelík vody do vany, pozorujeme, jak se pohyb tříští do stále menších částí kapaliny. „Pokračuje tato chaotizace do nekonečna?“ ptá se Perrin a pozoruje mikroskopem, že nikoli. Tak uzavírá:

„Poněvadž chaotizace pohybu v kapalině nepokračuje donekonečna, ale od určité úrovně již neroste, musí se kapalina ve skutečnosti skládat ze zrníček či molekul, které se mohou vůči sobě navzájem libovolně pohybovat, do jejichž vnitřku však již pohyb být přenesen nemůže. Pokud by takové molekuly neexistovaly, pak by chaotizace pohybu musela pokračovat bez omezení … “

Dva roky po Boltzmannově dobrovolné smrti se tak atomové hypotéze dostalo potvrzení, což ihned uznal i její největší odpůrce, W. Ostwald:

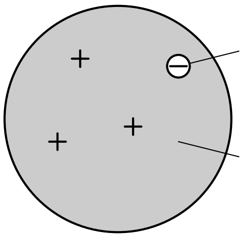
„Atomová hypotéza … byla povýšena na vědecky dobře podloženou teorii.“

3 Modely atomu

3.1 Thomsonův model atomu

Rokem 1897 je datován objev elektronu. Nebyl to objev v pravém slova smyslu. Experimenty 2. poloviny 19. století nashromáždily dostatek pozorování nabitých částic, které opouštějí povrchy různých kovů při „namáhání“, tj. při ozáření, v silném elektrickém poli, při žhavení, bombardování ionty s dostatečnou energií apod. Thomson všechny tyto pokusy zopakoval a pokaždé měřil parametry částic, jež opouštěly povrch kovu. Objev spočíval v tom, že tyto parametry byly pokaždé stejné – na světě byla „elementární částice“, později (Stoney) nazvaná *elektron*. Bylo to teprve dva roky po konferenci v Lübecku, kde se zastánci atomární teorie vedení Boltzmannem utkali s Ostwaldem a dalšími o samotné uznání atomu coby reálného jsoucna, tedy něčeho víc než jen užitečného modelu při popisu procesů přeměn energie.

Věren staré představě tuhých drobných částeček navrhl Thomson roku 1898 jednoduchý, tzv. *pudinkový model* atomu coby koule kladně elektricky nabité hmoty, uvnitř níž se jakoby rozinky pohybují elektrony (obr. 1).



Obr. 1 Thomsonův model atomu vodíku

Navenek byl model atomu elektricky neutrální. Tento atom nyní v sérii drobných úloh prozkoumáme kvantitativně.

Příklad 1 – elektron uvnitř Thomsonova atomu

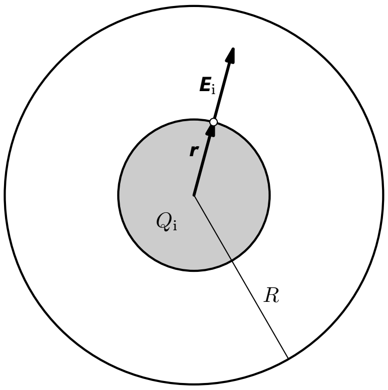
Určeme práci W_1 potřebnou na přenesení elektronu ze středu vodíkového atomu na jeho povrch.

Řešení

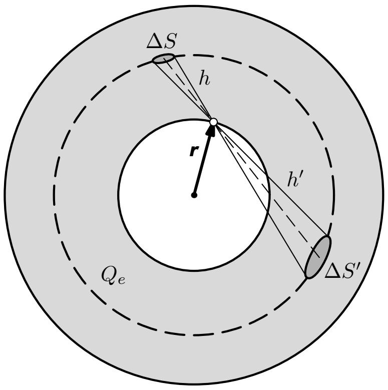
Buď v Thomsonově modelu vodíkový atom koulí o poloměru R, náboj elektronu je $-e$, náboj kladně nabité hmoty atomu je tedy $+e$. Okamžitou vzdálenost elektronu od středu atomové koule označme r. Hledanou práci můžeme určit integrováním, ale zde se pokusíme o elementární vyvození v naději, že zahlédneme i něco víc.

Dle principu superpozice je intenzita elektrického pole ve vzdálenosti $r < R$ od středu dána součtem intenzity $\boldsymbol{E}_\mathrm{i}$ elektrického pole od elektrického náboje Q_i

uzavřeného v kouli o poloměru r (obr. 2) a intenzity $\boldsymbol{E}_\mathrm{e}$ od náboje Q_e ve zbývající části koule (obr. 3).



Obr. 2 Elektrické pole vnitřní koule



Obr. 3 Elektrické pole zbývající části

Náboj vnitřní koule o poloměru r je $Q_\mathrm{i} = e\left(\dfrac{r}{R}\right)^3$ a intenzita jeho pole ve vzdálenosti r od středu koule má velikost

$$E_\mathrm{i} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{Q_\mathrm{i}}{r^2} = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 R^3} \cdot r. \tag{1}$$

Abychom určili intenzitu $\boldsymbol{E}_\mathrm{e}$, rozdělíme zbývající část koule na velmi tenké soustředné kulové slupky – jedna z nich je v obr. 3 vyznačena přerušovanou kružnicí. Pomocí úzké kuželové plochy s vrcholem v místě elektronu z ní vybereme malé plošky o velikostech ΔS, $\Delta S'$. Vzniknou dva kuželíky, které jsou geometricky podobné, z čehož plyne $\Delta S : \Delta S' = h^2 : h'^2$, kde h, h' jsou vzdálenosti středů plošek od elektronu. V Thomsonově modelu je kladný náboj e rozložen rovnoměrně, takže i plošná hustota σ náboje na slupce je konstantní a náboje na vybraných ploškách jsou v poměru $Q : Q' = S : S'$. Porovnáním obou vztahů dostaneme

$$\frac{Q}{h^2} = \frac{Q'}{h'^2},$$

odkud vidno, že intenzity elektrických polí obou plošek se v místě elektronu ruší. Takto lze ovšem celou slupku rozdělit na dvojice plošek a vždy se jejich elektrostatické pole v místě elektronu vyruší. Obecná volba slupky pak zaručuje, že intenzita $\boldsymbol{E}_\mathrm{e}$ v místě elektronu je nulová a výsledné intenzita elektrického pole kladného náboje celé koule v místě elektronu má velikost $E = E_\mathrm{i}$. Na elektron tedy působí elektrostatická síla o velikosti

$$F = E_\mathrm{i} e = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3} \cdot r. \tag{2}$$

To je závěr, který stál za námahu. Soustava je „atomovou pružinou“ o tuhosti $k = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3}$. Elektron je do středu atomu přitahován silou přímo úměrnou jeho vzdálenosti od středu – při sebemenší výchylce z rovnovážné polohy nastanou harmonické kmity.

Práce potřebná k přemístění elektronu ze středu atomu až na jeho povrch je

$$W_1 = \frac{1}{2}kR^2 = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 R}. \tag{3}$$

Příklad 2 – elektron vně Thomsonova atomu

Určeme práci W_2 potřebnou na přenesení elektronu s povrchu vodíkového atomu do nekonečna.

Řešení

Ani zde není nutno nasazovat k výpočtu práce integraci. Pole kladného náboje rovnoměrně rozloženého v Thomsonově atomu je vně atomu stejné, jako kdyby byl náboj soustředěn v jeho středu. Potenciál pole vně atomu je roven

$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e}{r}, \tag{4}$$

proto

$$W_2 = -e(\varphi(\infty) - \varphi(R)) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R}. \tag{5}$$

Příklad 3 – velikost Thomsonova atomu

Ionizační práce atomu vodíku byla změřena jako $W_\mathrm{i} = 13{,}6$ eV. Odvoďte z předchozích výpočtů poloměr R koule, tj. velikost Thomsonova vodíkového atomu.

Řešení

Zřejmě platí

$$W_\mathrm{i} = W_1 + W_2 = \frac{3}{8\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R},$$

odkud

$$R = \frac{3e^2}{8\pi\varepsilon_0 W_\mathrm{i}}. \tag{6}$$

Číselně pro $e = 1{,}60 \cdot 10^{-19}$ C, $\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}$ $\mathrm{C}^2 \cdot \mathrm{N}^{-1} \cdot \mathrm{m}^{-2}$ vychází $R = 1{,}59 \cdot 10^{-10}$ m, tedy 1,59 Å.

Poznámka:

To je velmi uspokojivý výsledek. Perrin při výkladu Brownova pohybu nezůstal jen u kvalitativních úvah. Vzápětí ukázal, že se soubor brownovských částic chová jako ideální plyn, což mu při znalosti velikosti částic, jejich koncentrace, hustoty i hustoty kapaliny dovolilo přibližně určit Avogadrovu konstantu (tehdy $N_\mathrm{A} = 7 \cdot 10^{23}\ \mathrm{mol}^{-1}$). Z molárních hmotností látek (řádově (10^1 až 10^2) $\mathrm{g} \cdot \mathrm{mol}^{-1}$) určil absolutní hmotnosti molekul v rozmezí (10^{-27} až 10^{-26}) kg a při známé hustotě látek řádově $10^3\ \mathrm{kg} \cdot \mathrm{m}^{-3}$ získal objemy molekul okolo $10^{-30}\ \mathrm{m}^3$, tedy rozměr atomu řádově 10^{-10} m. Shoda je pěkná.

Příklad 4 – atomová pružina

Určete tuhost „atomové pružiny“ a frekvenci kmitů elektronu uvnitř vodíkového atomu.

Řešení

Pro tuhost $k = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3}$ vychází při $R = 1{,}59$ Å hodnota $k = 57\ \mathrm{N} \cdot \mathrm{m}^{-1}$, což je málo: Kilogramové závaží by v našem tíhovém poli takovou pružinu protáhlo téměř o dva decimetry.

Úhlová frekvence kmitů elektronu $\omega = \sqrt{\dfrac{k}{m}}$, kde $m = 0{,}91 \cdot 10^{-30}$ kg, činí $7{,}9 \cdot 10^{15}\ \mathrm{rad} \cdot \mathrm{s}^{-1}$. Mezi spektrálními čarami vodíku předvídá tedy Thomsonův model i světlo o vlnové délce $\lambda = \dfrac{2\pi c}{\omega} = 238$ nm.

Poznámka:

Do viditelného oboru spadá záření vlnových délek od 380 nm do 780 nm (viz tabulka na konci textu). Model tedy předpokládá interakci atomu s UV zářením. To je kvantitativní nesoulad.

Je zajímavé, že od Thomsonova návrhu z roku 1898 uplynulo celých 13 let, než se pudinkovému modelu dostalo řádného experimentálního ověření. V roce 1911 navrhl E. Rutherford celkem jednoduchý způsob, jak se o atomu něco dozvědět: velmi tenkou zlatou fólii nastřeloval tzv. heliony, ionty helia ${}^4_2\mathrm{He}^{2+}$ a z rozptylového obrazce plánoval usoudit na vnitřní stavbu atomu. Pokusme se výsledek předpovědět v Thomsonově modelu.

Příklad 5 – interakce helionu s atomem zlata

Odhadněte maximální odchylku helionu od přímého směru letu při interakci s atomem zlata.

Řešení

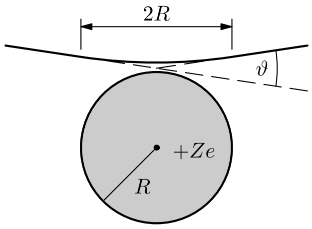
a) Předpokládejme nejprve interakci s kladnou hmotou atomu. Z Př. 1 víme, že uvnitř atomu je intenzita pole $E_1 = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \dfrac{Ze}{R^3} \cdot r$, kde $Z = 79$ je atomové číslo zlata, r je vzdálenost, v níž helion prolétá od jeho středu. Vně atomu klesá intenzita el. pole podle vztahu $E_2 = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \dfrac{Ze}{r^2}$. Interakce bude tedy nejsilnější v případě, kdy se heliony „dotknou“ atomu, pro $r = R$, kde $E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{Ze}{R^2}$. Odpudivá síla bude mít velikost $F = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{2e \cdot Ze}{R^2}$, ovšem její vliv musíme omezit jen na tak velkou oblast v okolí atomu zlata, kde je aspoň přibližně splněna podmínka $r \approx R$, tj. na dráhu velikosti řekněme $s = 2R$ (obr. 4). Je-li velikost rychlosti helionu V, bude silové působeni trvat dobu $\frac{s}{V}$, čímž dojde ke změně hybnosti

$$\Delta p = \frac{Fs}{V} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{4Ze^2}{RV}$$

kolmo na původní směr. Úhel vychýlení bude roven

$$\vartheta_1 = \frac{\Delta p}{p} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{4Ze^2}{MRV^2}, \tag{7}$$

kde M je hmotnost helionu.



Obr. 4 Odchýlení helionu v poli kladného náboje Ze.

Nyní odhadneme důsledky interakce s elektronem. Označme jeho hmotnost m, rychlost při kolizi buď statisticky nulová. Pro porázovou rychlost v elektronu lze snadno odvodit (viz [7]) $v = \frac{2MV}{M+m}$. Elektron si po srážce odnáší hybnost $p = mv$, což při poměru $M/m \doteq 7\,300 \gg 1$ dává $p \approx 2mV$. Chceme-li odhadnout největší možnou odchylku helionu od přímé dráhy, uvažujme, že elektron je při srážce odmrštěn kolmo k dráze helionu a helion podle zákona zachování hybnosti přijme stejně velkou hybnost ve směru opačném, tj. také kolmo k původní dráze letu. Úhel odchylky je

$$\vartheta_2 = \frac{p}{MV} = \frac{2m}{M}. \tag{8}$$

Výrazy (7) a (8) vyčíslíme. K tomu

i) $M = 4m_\mathrm{u} = 4 \cdot 1{,}67 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{kg} = 6{,}7 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{kg}$,

ii) poloměr atomu zlata odhadneme z požadavku, aby hmota atomu měla bez ohledu na atomové číslo stejnou hustotu – pak musí poloměr růst s třetí odmocninou hmotnostního čísla. Pro zlato bude $R = 1{,}59 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m} \cdot \sqrt[3]{197} = 9{,}3 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m}$.

iii) Rychlost helionu určíme z jeho energie. Geiger s Marsdenem měli $E = 7{,}7\,\mathrm{MeV}$, takže $V^2 = \dfrac{2E}{M} = 3{,}7 \cdot 10^{14}\,\mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}^{-2}$.

Pak při interakci s kladnou hmotou atomu vychází $\vartheta_1 = 3 \cdot 10^{-5}$ rad, při srážce s elektronem dostáváme $\vartheta_2 = 27 \cdot 10^{-5}$ rad, tedy průměrně $\vartheta = 15 \cdot 10^{-5}$ rad. Počítali jsme ovšem s maximálními odchylkami, proto střední hodnotu zaokrouhlíme na $\overline{\vartheta} = 8 \cdot 10^{-5}$ rad.

To je ovšem velmi málo. Otázkou nicméně je, zda řada po sobě jdoucích interakcí helionu s atomy fólie nakonec přece jen nedokáže způsobit výraznější odchylku od původního směru. Skládání náhodných vlivů řeší statistika a jejích závěrů nyní v jednoduchém přiblížení využijeme.

Příklad 6 – náhodná procházka

Odvoďme vztah pro střední vzdálenost částice od počátku pohybu za předpokladu, že částice v každém kroku urazí stejně velkou dráhu s, avšak směr posunutí $\boldsymbol{s}$ je zcela náhodný.

Řešení

Nechť $\boldsymbol{r}_i$ je polohový vektor částice v soustavě spjaté s počátkem pohybu, a to po i-tém kroku. Zřejmě platí

$$\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}_{i-1} + \boldsymbol{s}_i. \tag{9}$$

Máme-li využít náhodnosti směrů vektorů posunutí $\boldsymbol{s}_i$ a stejnosti jejich velikosti, musíme přejít k velikostem polohových vektorů. Platí

$$r_i^2 = r_{i-1}^2 + 2\boldsymbol{r}_{i-1} \cdot \boldsymbol{s}_i + s^2.$$

Sečtením těchto rovnic přes všechny kroky se zbavíme rekurence:

$$r_n^2 = 2\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{r}_{i-1} \cdot \boldsymbol{s}_i + ns^2. \tag{10}$$

V poslední rovnici využijeme náhodnosti směrů vektorů $\boldsymbol{s}_i$: pro dostatečně velký počet kroků bude suma v (10) celkově nulová. Pak

$$r_n = \sqrt{n} \cdot s. \tag{11}$$

To je poměrně elegantní výsledek a navíc v souladu s naší intuicí: vzdálenost od počátku sice s časem roste, ale pomaleji, než kdyby se částice při interakcích nenechávala ovlivnit a držela by $\boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{konst}$. (V teorii difúzních jevů najdeme řešení $r(t) = D\sqrt{t}$, kde D je tzv. difúzní konstanta.)

Vrátíme-li se opět k helionům odkláněným interakcemi s atomy zlata uvnitř fólie, zbývá znát počet vrstev n (Rutherfordova fólie měla $n \doteq 10^4$), abychom spočetli celkový střední úhel odklonu $\overline{\Theta} = \sqrt{n} \cdot \overline{\vartheta} =$ necelého půl stupně. Celková střední odchylka stanovená tehdy u pokusu činila dvojnásobek, což není špatný výsledek.

Blížíme se k rozuzlení experimentu. Uvědomme si tedy, že předpověď skoro žádný zásadní odklon částice alfa při průchodu zlatou fólií neočekávala, a to se také potvrdilo, neboli většinové chování helionů nijak proti Thomsonově modelu nesvědčilo. Kdo zásadním způsobem rozhodl o chybě modelu, byli „disidenti", částice, u nichž měření zaznamenalo odklon výrazný, nejméně $\pi/2$. Těch se čekalo velmi málo a skutečně: byly nalezeny přibližně v jednom z 8 000 případů, tedy s pravděpodobností asi 10^{-4}.

Avšak z teorie pravděpodobnosti (viz [8]) plyne, že pravděpodobnost nálezu hodnoty x v souboru se střední hodnotou $\overline{x}$ prudce klesá s velikostí odchylky x od $\overline{x}$: $P(x) \sim \mathrm{e}^{-(x/\overline{x})^2}$. To v naší situaci ($\Theta = 90°$, $\overline{\Theta} = 1°$) dává pravděpodobnost

$$P \doteq \mathrm{e}^{-90^2} = (\mathrm{e}^3)^{-2\,700} \doteq 10^{-3\,500}.$$

(Využili jsme odhadů $\mathrm{e}^3 \doteq 20$, $2^{10} \doteq 10^3$.)

Rozdíl mezi odhadem a naměřenými daty je astronomický. Později jej komentoval sám Rutherford: *„Je to něco tak málo pravděpodobné, jako kdybyste patnáctipalcovým dělostřeleckým granátem stříleli do tenkého cigaretového papíru a náboj by se náhle odrazil a letěl přímo na vás."*

„Disidentů" bylo přece jen trochu víc a Thomsonův model musel být opuštěn: V atomu řádové velikosti 10^{-10} m je kladný elektrický náboj zřejmě soustředěn do mnohem menší oblasti.

Příklad 7 – rozměr jádra

Odhadněme nyní zpětně, jak velký by musel být poloměr kulové oblasti kladného náboje atomu, aby předpovězená střední odchylka $\overline{\Theta}$ dráhy helionu souhlasila s daty v Geigerově a Marsdenově experimentu.

Řešení

Aby výraz $\mathrm{e}^{-(\Theta/\overline{\Theta})^2}$ dával hodnotu 1/8 000, musí být $\Theta/\overline{\Theta} \doteq 3{,}0$, tj. při $\Theta = 90°$ musí být $\overline{\Theta} = 30°$. To je s ohledem na výpočty v příkladu 5 tak velká hodnota, že vyžaduje odlišný model celé situace. Víme-li, že interakce s elektrony vede k maximální odchylce $\vartheta = 2{,}7 \cdot 10^{-4}$ rad, je zřejmé, že výrazné vychýlení směru pohybu helionů je důsledkem interakce s kladně nabitou hmotou atomu, avšak v rozměru tak malém, že elektrostatická odpudivá síla způsobí podstatné vychýlení. To nás opravňuje mluvit o existenci *„jádra atomu"*. Zároveň však z tohoto zjištění plyne, že setkání helionu s jádrem je s ohledem na velikost jádra velmi nepravděpodobné a že spíše než statistickým nastřádáním velmi malých odchylek řádu 10^{-5} rad nastává výrazný odklon jako následek jediné intenzivní interakce. Rutherford tuto úvahu skutečně přijal.

Ze vztahu (7) pak pro poloměr jádra vychází

$$R = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 E_\mathrm{k}\overline{\Theta}}, \tag{12}$$

kde $E_\mathrm{k} = 7{,}7$ MeV je kinetická energie helionu a podobně jako při odvození $\overline{\vartheta}$ jsme odpudivou sílu vzali poloviční z maximální odhadnuté hodnoty. Číselně

$$R = \frac{9{,}0 \cdot 79 \cdot 2{,}56}{7{,}7 \cdot 1{,}6 \cdot (\pi/6)} \cdot 10^{9-38-6+19}\ \mathrm{m} = 2{,}8 \cdot 10^{-14}\ \mathrm{m}.$$

Výsledek je v dobré shodě s dalšími měřeními.

Oproti Thomsonově elektricky kladně nabité hmotě vyplňující celý prostor atomu s rozměrem řádově velikosti 10^{-10} m, do níž jsou zapuštěny záporně nabité a ne nutně pohyblivé elektrony, ukázala Rutherfordova měření prokazatelně na existenci velmi malého jádra, okolo něhož se ve vzdálenostech o čtyři řády větších pohybují záporně nabité elektrony.

3.2 Rutherfordův model atomu

Dynamický Rutherfordův model, v němž elektrony krouží kolem malého, těžkého a kladně nabitého jádra, neboť bez orbitálního pohybu by se do jádra zhroutily, připomíná silně planetární seskupení, jak je známe ve Sluneční soustavě. Model se proto někdy nazývá *planetární* a z téhož důvodu byl přijímán – vzdor nedostatkům – s uspokojením. Připomínal starou filozofickou koncepci, v níž jeden svět, *unus mundus* nese pečeť jednoho zákona a vykazuje proto strukturální, tvarovou podobnost na všech úrovních bytí, tj. jak v megakosmu, tak v makrokosmu a nyní i na úrovni mikrokosmické.

Užitím klasické dynamiky odvodíme nejdůležitější vlastnosti vodíkového atomu v Rutherfordově modelu.

Příklad 8 – planetární model atomu vodíku

Prozkoumejte energetické poměry v soustavě proton-elektron s elektronem obíhajícím po kruhové dráze.

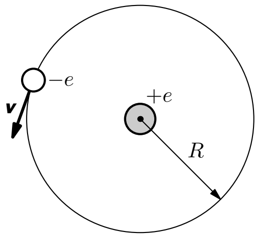
Řešení

Nechť elektron krouží kolem protonu (obecně kolem jádra) po kruhové dráze o poloměru R (obr. 5). Potenciální energie elektrostatická soustavy proton-elektron je rovna

$$E_\mathrm{p} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R}$$

a je záporná, neboť interakce je přitažlivá, svazující.

Elektron má kinetickou energii $E_\mathrm{k} = \frac{1}{2}mv^2$, jeho rychlost v závislosti na vzdálenosti R od jádra určíme z identity



Obr. 5 Rutherfordův model atomu vodíku

$$\frac{mv^2}{R} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R^2}, \tag{13}$$

která vyjadřuje podmínku setrvání elektronu na kruhové oběžné dráze. Roli potřebné dostředivé síly sehrává elektrostatická přitažlivá síla. Z (13) plyne

$$E_\mathrm{k} = \frac{1}{2}\,\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R} \quad \text{tedy} \quad 2E_\mathrm{k} + E_\mathrm{p} = 0,$$

což je zvláštní případ tzv. *viriálového teorému.* (Stejný platí i při oběhu tělesa (družice) kolem atraktoru (hvězdy, planety) v gravitačním poli.) Celková energie soustavy

$$E = E_\mathrm{p} + E_\mathrm{k} = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R} \tag{14}$$

je záporná, neboť stav je vázaný a stabilní.

Podobně jako u Thomsonova modelu můžeme nyní z experimentálního poznatku (znalost ionizační práce atomu vodíku $W_\mathrm{i} = 13{,}6$ eV) vyvodit velikost vodíkového atomu. Zřejmě

$$R = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 W_\mathrm{i}}, \tag{15}$$

což ve srovnání s (6) dává hodnotu R třikrát menší, $R = 0{,}529$ Å. To je již hodnota, která souhlasí i s jinými výpočty.

Povzbuzeni číselnou shodou, pokusme se v Rutherfordově planetárním modelu navrhnout i atom složitější.

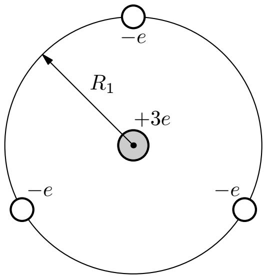
Příklad 9 – planetární model atomu lithia

Prozkoumejte energetické poměry v soustavě proton-elektron s elektronem obíhajícím po kruhové dráze.

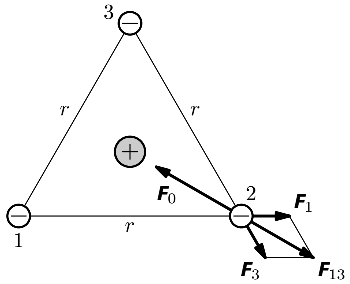
Řešení

V nejjednodušším přiblížení, bez omezení, která by do našich úvah mohla vnést například kvantová mechanika, uvažujme symetrický planetární model podle obr. 6. Tři elektrony v něm vázané symetricky, tj. ve vrcholech rovnostranného trojúhelníku, obíhají po společné oběžné dráze o poloměru R_1. Výsledná síla působící na každý elektron je dána vektorovým součtem $\boldsymbol{F}_{13}$ od druhých elektronů a přitažlivé síly $\boldsymbol{F}_0$ od jádra atomu (obr. 7). Zřejmě $F_1 = F_3 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}$, jejich výslednice má velikost $F_{13} = F_1\sqrt{3}$. Jádro poutá každý elektron silou o velikosti $F_0 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{3e^2}{R_1^2}$. Přitom $r^2 = 3R_1^2$, takže výsledná síla má velikost

$$F = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{3}{R_1^2} - \frac{\sqrt{3}}{3R_1^2}\right) = \frac{3e^2}{4\pi\varepsilon_0 R_1^2}\left(1 - \frac{1}{3\sqrt{3}}\right).$$



Obr. 6 Planetární model atomu lithia

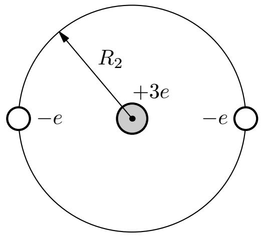


Obr. 7 Síly působící na elektron

Tato síla hraje roli dostředivé síly $4\pi^2 m R_1 f^2$, odkud srovnáním vyjde frekvence oběhů

$$f_1 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{3e^2}{4\pi\varepsilon_0 m R_1^3}\left(1 - \frac{1}{3\sqrt{3}}\right)}.$$

Pro číselný výpočet bychom museli znát poloměr kruhové dráhy R_1, což je nesnadno získatelný údaj. Doposud, viz (6), (11), jsme tento nedostatek obcházeli tak, že jsme poloměr dráhy dopočítali ze znalosti ionizační práce W_i. Předpokládejme tedy, že známe (první) ionizační práci W_1. Elektronová struktura se po odstranění elektronu změní: zbývající dva elektrony zaujmou symetrické polohy na nové kruhové dráze s poloměrem R_2 (obr. 8) a celková energie atomu vzroste o W_1.



Obr. 8 Planetární model iontu Li^+

Pokud bychom ionizovali tento lithiový ion, tj. provedli druhou ionizaci (ionizační práci označme W_2), přejde soustava v tzv. *vodíkupodobný* iont Li^{2+} s jediným elektronem kroužícím okolo trojice kladně nabitých protonů.

Konečně třetí ionizace by atom zbavila zbývajícího elektronu a zbylo by jen kladně nabité jádro a nekonečně (v praxi to znamená dostatečně) vzdálené elektrony.

Cesta k řešení spočívá v tom, že určíme energii atomu, resp. iontu v každém z popisovaných stavů a porovnáním zjistíme ionizační práce W_1, W_2, W_3:

1. Energie E_1 základního stavu atomu lithia je dána součtem potenciální energie E_{p1} elektrostatických sil mezi náboji a kinetické energie E_{k1} obíhajících elektronů. Přitom E_{p1} je rovna součtu kladné potenciální energie $E_{\mathrm{p1}}(+)$ odpudivých sil mezi elektrony a záporné potenciální energie $E_{\mathrm{p1}}(-)$ přitažlivých sil k jádru. Platí:

$$E_{\mathrm{k1}} = 3\cdot\frac{1}{2}m(2\pi f_1 R_1)^2 = \frac{9}{2}\cdot\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{R_1}\left(1 - \frac{1}{3\sqrt{3}}\right),$$

$$E_{\mathrm{p1}}(+) = 3 \cdot \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R_1\sqrt{3}}, \qquad E_{\mathrm{p1}}(-) = -3 \cdot \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{3e^2}{R_1},$$

celkem tedy

$$E_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R_1} \cdot \frac{\sqrt{3}-9}{2} < 0, \quad \text{stav je vázaný} \tag{16a}$$

2. Energie E_2 iontu Li^+ je obdobně dána součtem složek energie $E_{\mathrm{p2}} + E_{\mathrm{k2}}$, přičemž analogicky $E_{\mathrm{p2}} = E_{\mathrm{p2}}(+) + E_{\mathrm{p2}}(-)$. Jednotlivé příspěvky opět vyčíslíme: $E_{\mathrm{k2}} = 2 \cdot \frac{1}{2} m v_2^2$, přičemž v_2 určíme z identity síly elektrické $F = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R_2^2} \left(3 - \frac{1}{4}\right)$ coby síly dostředivé $\frac{m v_2^2}{R_2}$. Platí:

$$E_{\mathrm{k2}} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R_2} \cdot \frac{11}{4},$$

$$E_{\mathrm{p2}}(+) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2R_2}, \qquad E_{\mathrm{p2}}(-) = -2 \cdot \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{3e^2}{R_2},$$

celkem tedy

$$E_2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R_2} \left(-\frac{11}{4}\right). \tag{16b}$$

3. Konečně energie dvakrát ionizovaného atomu s jedním elektronem na kruhové dráze o poloměru R_3 bude

$$E_3 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{3e^2}{R_3} \left(-\frac{1}{2}\right). \tag{16c}$$

Poznámka

Povšimněme si, že v každém ze tří případů platí viriálový teorém: celková energie soustavy je záporná (atom, resp. iont drží pohromadě) a je rovna záporně vzaté kinetické energii.

4. Třetí ionizace elektrickou soustavu zruší, její náboje vzdálí do nekonečna, takže

$$E_4 = 0. \tag{16d}$$

Nyní stačí porovnat energie jednotlivých stavů mezi sebou. Zřejmě platí

$$E_1 + W_1 = E_2, \quad E_2 + W_2 = E_3, \quad E_3 + W_3 = E_4,$$

což po dosazení vede na soustavu rovnic, jejichž řešením dostaneme

$$R_3 = \frac{3}{8\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{W_3}, \quad R_2 = \frac{11}{16\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{W_3 + W_2}, \quad R_1 = \frac{9-\sqrt{3}}{8\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{W_3 + W_2 + W_1}.$$

Vyhledáním číselných dat $W_1 = 5{,}4$ eV, $W_2 = 81{,}6$ eV, $W_3 = 122$ eV získáme po dosazení $R_1 = 0{,}25$ Å, $R_2 = 0{,}19$ Å, $R_3 = 0{,}18$ Å.

Ve srovnání s vodíkovým atomem by neměly překvapit malé hodnoty R. U rovnostranného trojúhelníka je vzdálenost mezi sousedními vrcholy větší než vzdálenost vrcholu od těžiště. Oproti přitažlivosti jádra (navíc s nábojem $3e$) je coulombické odpuzování mezi elektrony slabší, takže výsledná síla je větší a elektrony jsou blíž k jádru.

Uvedený postup zkoumání atomů je zjednodušeným, diskrétním případem obecnější myšlenky, s níž roku 1903 představil svůj model H. Nagaoka a v níž uvažoval elektrony kroužící kolem jádra v podobě saturnského prstence. Nagaoka tak ještě před Rutherfordem odmítl Thomsonův model, neboť elektrické náboje považoval za neproniknutelné. Model však nevysvětloval stabilitu elektronového prstence a byl později opuštěn.

Jakkoli je planetární model atomu při své jednoduchosti úspěšný, byl od samého počátku vnímán jako provizorium. Od Maxwellovy teorie elektromagnetického pole (1873) bylo přes 30 let známo, že zrychleně se pohybující elektrický náboj září (viz úloha 5), tj. odevzdává energii. Po kruhové dráze obíhající elektron se pohybuje samozřejmě zrychleně, bylo by tedy otázkou, za jakou dobu svou energii vyzáří a zhroutí se na jádro.

Příklad 10 – zhroucení atomu

Odhadněme dobu, za kterou se elektron v planetárním modelu atomu vodíku zhroutí na jádro.

Řešení

Úloha patří k těm neodhadnutelným příkladům, které činí fyziku dobrodružstvím: za pár minut budeme mít představu, zda by měl mít v našem modelu atom k životu vyhrazen zlomek sekundy. Pokud ano, zhroutí se náš model a bude zpochybněna použitelnost zákonů klasické (elektro)dynamiky v mikrosvětě rozměrů alespoň 10^{-10} m. Může se však stát – to v počátku úvah není zřejmé – že dobu života odhadne výpočet řádově v miliardách let, a pak si na vyvrácení hypotézy budeme muset ještě počkat.

Přesné odvození výkonu elektromagnetického záření vysílaného zrychleně se pohybujícím nábojem dává vztah $P = \frac{1}{6\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{q^2 a^2}{c^3}$. Zrychlení elektronu bereme přibližně rovno dostředivému zrychlení na kruhové dráze o okamžitém poloměru r: $a = \frac{v^2}{r}$, kde okamžitou rychlost v odvodíme z podmínky (13). Změna (úbytek) energie za krátkou dobu $\mathrm{d}t$ činí

$$\mathrm{d}E = -\frac{1}{6\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{c^3} \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \frac{e^4}{m^2 r^4} \, \mathrm{d}t = -\frac{2}{3} \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^3} \frac{e^6}{c^3 m^2} \frac{1}{r^4} \, \mathrm{d}t$$

a s ohledem na (14)

$$\mathrm{d}E = -\frac{32}{3} \cdot 4\pi\varepsilon_0 \cdot \frac{1}{m^2 e^2 c^3} \cdot E^4 \, \mathrm{d}t. \tag{17}$$

To je rovnice katastrofického scénáře: jak elektron ztrácí energii, přibližuje se k jádru a současně (podle Keplerova zákona) roste jeho oběžná rychlost, čímž výrazně vzrůstá jeho zrychlení a tím i vyzařovaný výkon, což pád dále urychluje.

Označme $K = \frac{32}{3} \cdot 4\pi\varepsilon_0 \cdot \frac{1}{m^2e^2c^3}$, pak řešení diferenciální rovnice

$$\frac{\mathrm{d}E}{E^4} = -K\mathrm{d}t$$

dává

$$E^3(t) = \frac{1}{3Kt + E_0^{-3}} = \frac{1}{3K(t - t_0)}, \tag{18}$$

přičemž integrační konstanta $t_0 = -\frac{E_0^{-3}}{3K}$ má právě význam doby trvání celého děje. Určíme ji z počáteční podmínky (14):

$$t_0 = \frac{1}{3K} \cdot \frac{(8\pi\varepsilon_0)^3}{e^6} R^3,$$

a po dosazení za K

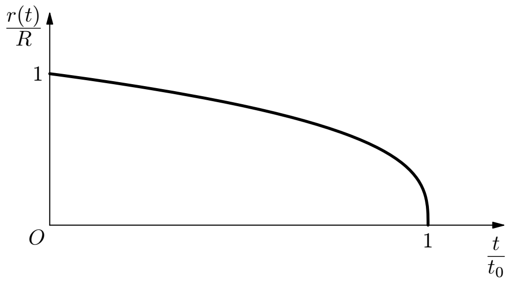
$$t_0 = \frac{4\pi^2\varepsilon_0^2 m^2 c^3 R^3}{e^4}. \tag{19}$$

Číselně pro $\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{F \cdot m^{-1}}$, $m = 0{,}911 \cdot 10^{-30}$ kg, $c = 3{,}00 \cdot 10^8\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$, $e = 1{,}60 \cdot 10^{-19}$ C, $R = 0{,}529 \cdot 10^{-10}$ m vychází $t_0 = 1{,}6 \cdot 10^{-11}$ s.

Časový průběh přibližování elektronu k jádru, tj. závislost $r = r(t)$ odvodíme z (14) a (18):

$$\frac{r(t)}{R} = \sqrt[3]{1 - \frac{t}{t_0}}, \tag{20}$$

kde jsme pro zjednodušení zavedli poměrnou vzdálenost $r(t)/R$ a poměrný čas t/t_0 (obr. 9).



Obr. 9 Závislost vzdálenosti padajícího elektronu od jádra na čase

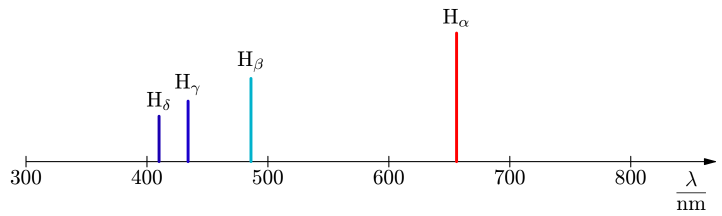
V blízkosti jádra roste v klasickém přiblížení rychlost elektronu nade všechny meze, viz úloha 6, přesný výpočet musí být v posledku veden relativisticky, nicméně na krátkodobosti života elektronu v atomu tato oprava nic podstatného nezmění. Klasický přístup zřejmě selhává ještě z jiných důvodů.

3.3 Kvantová hypotéza

Než se zmíníme o Bohrově návrhu, jak planetární model uchovat a přitom obejít nároky klasické elektrodynamiky, připomeňme Planckovu-Einsteinovu hypotézu, která sice pochází z jiného okruhu problémů, nicméně pro výklad poměrů v atomu se ukázala klíčovou.

Rozvoj techniky, konkrétně optiky a spektroskopie, především v Německu ve 2. polovině 19. století připravil fyzikům bohatý materiál k interpretaci. Nedostatečný byl výklad čárových spekter individuálních atomů a chyběl uspokojivý výklad spojitých spekter zahřátých látek v kondenzovaném stavu (kapalina, pevná látka), kdy se individuální chemické vlastnosti (akcentované u čárových spekter) stírají a dominantní při interakci látky a záření se stávají kolektivní termodynamické projevy.

Čárová spektra atomů vykazovala podobnost, pokud se naměřené vlnové délky podařilo utřídit do jistých skupin, tzv. sérií. Už roku 1885 objevil takovou sérii J. Balmer ve viditelné části spektra atomu vodíku (obr. 10).



Obr. 10 Viditelné čáry Balmerovy série atomu vodíku

Ve spleti spektrálních dat se mu podařilo najít řád a viditelné čáry uspořádat do vzorce podle jejich vlnové délky:

$$\frac{1}{\lambda_k} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{k^2}\right), \quad k = 3, 4, 5, \ldots, \tag{21}$$

kde konstanta R (dnes Rydbergova) $= 1{,}097 \cdot 10^7\ \text{m}^{-1}$. Série končí na tzv. hraně, pro $k \to \infty$ a odpovídající $\lambda_\infty = \dfrac{4}{R} = 365$ nm je v dobrém souhlasu s experimentem.

Důležitým objevem bylo, že podle vzorce obdobného (21) lze uspořádat i další spektrální čáry vodíku, které leží v ultrafialové, resp. infračervené části spektra, přičemž konstanta R byla vždy stejná. Platí tedy

$$\frac{1}{\lambda_{nk}} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right), \quad k = n+1, n+2, \ldots, \tag{22}$$

kde série pro $n = 1, 2, 3$ atd. dostaly po řadě jméno *Lymanova, Balmerova, Brackettova, Pfundova,* viz Úloha 7. Vztahy byly nicméně empirické – chyběla fyzikální představa, která by je zdůvodňovala.

Stejně vážným problémem zůstával nedostatečný výklad spojitého spektra záření zahřátých těles, v abstraktním modelu konkrétně spektra záření tzv. *černého tělesa,* tj. tělesa, které veškeré dopadající záření absorbuje, nic neodráží a samo vysílá rovnovážné záření poté, co se (např. v dutině tělesa) ustavila termodynamická rovnováha mezi stěnami tělesa a v tělese uzavřeným elektromagnetickým zářením. Závislost spektrální hustoty intenzity vyzařování H_λ (definované podílem plošné hustoty výkonu záření měřeného v úzkém oboru vlnových délek okolo střední délky λ a šířkou $\Delta\lambda$ tohoto intervalu) na vlnové délce λ (obr. 11) představovala typický kruciální problém, při jehož řešení se setkávaly úhelné kameny klasické fyziky: dynamika, vlnění, termodynamika i teorie elektromagnetického pole.

Roku 1860 G. R. Kirchhoff odvodil, že intenzita vyzařování M (tj. plošná hustota výkonu záření ($\mathrm{W/m^2}$)) s povrchu černého tělesa závisí pouze na jeho termodynamické teplotě. Poté L. Boltzmann teoreticky (tepelné záření v dutině považoval za plyn – připomeňme si, že v době, kdy částicová povaha plynu, natož záření (!) byla utopií) a I. Stefan pokusně nalezli závislost $M \sim T^4$. Stefan také změřil (dnes Stefanovu-Boltzmannovu) konstantu úměrnosti:

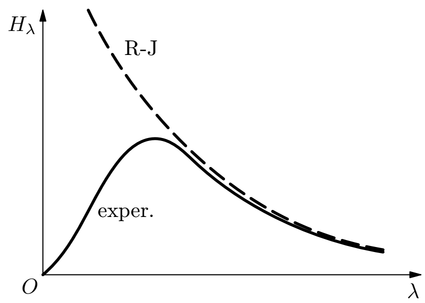
$$M = \sigma T^4, \qquad \sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}}. \tag{23}$$

Ještě o něco později W. Wien vyvodil tzv. *posunovací zákon,* podle něhož s rostoucí termodynamickou teplotou tělesa nepřímo úměrně klesá vlnová délka, na níž pozorujeme maximální hodnotu H_λ (tj. na níž těleso sálá nejvíc):

$$\lambda_{\max} \cdot T = b, \tag{24}$$

kde konstanta Wienova zákona $b = 2{,}898 \cdot 10^{-3}\ \mathrm{m \cdot K}$.

A přece všechny pokusy vyvodit teoreticky tvar funkce H_λ selhávaly, a to zásadním způsobem, pro nějž se vžil název *ultrafialová katastrofa.* Předpověď, jakou na základě klasického odvození učinili lord Rayleigh a J. Jeans, dobře souhlasila v dlouhovlnné části spektra, avšak tragicky selhávala pro krátké vlnové délky (obr. 11).



Obr. 11 Křivka spektrální hustoty intenzity vyzařování (exper.) a křivka předpovězená Rayleighem a Jeansem (R-J)

Roku 1900 podal tvar hledané závislosti Max Planck. Jeho funkce měla tvar

$$H_{\lambda,T} = 2\pi hc^2 \frac{1}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\dfrac{hc}{\lambda kT}\right) - 1}. \tag{25}$$

Přes výbornou shodu s naměřenými daty zůstávalo Planckovi nicméně obtížné připustit plný význam fyzikální interpretace vlastního postupu. Ten pro něj byl spíše matematickým a možnou fyzikální interpretaci Planck velmi opatrně zkoumal a zvažoval. Jeho tzv. *kvantová hypotéza* zní: Emise a absorbce zářivé energie probíhá ne spojitě, ale po celistvých násobcích tzv. *kvanta.* (Planck je nazýval účinkové kvantum, *Wirkungsquantum*) ε

$$\varepsilon = h \cdot f, \tag{26}$$

kde f je frekvence záření a h konstanta, dnes Planckova konstanta

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

Poznámka
Součin energie a času připomíná fyzikální veličinu *akci* $\mathcal{S}$ definovanou integrálem $\mathcal{S} = \int\limits_0^t (E_\mathrm{k} - E_\mathrm{p})\mathrm{d}\tau$ s významem časového úhrnu nesymetrie v rozdělení energie mezi kinetickou a potenciální. Srovnejte například, jak se rozdělení celkové mechanické energie mění při volném pádu. Odtud Planckovo pojmenování *Wirkungsquantum*.

Když se o pět let později chopil kvantové hypotézy A. Einstein při výkladu fotoelektrického jevu, zvolil pro energetické kvantum hf slovo *Lichtquantum*. Planckovo kvantování energie atomárních oscilátorů rozšířil na kvantování záření a svému *„světelnému kvantu"* přiznal plnou, reálnou fyzickou existenci.

Zajímavostí zůstává opatrný, rozpačitý vztah k vlastní hypotéze, jak přetrvával u Plancka. V jiné podobě vrcholila táž krize, jakou do fyziky vnesla sama myšlenka atomů: není překvapením, že tyto „ostrovy nespojitosti" samy vykazovaly nespojitost ve svých bytostných projevech. Ať objevení se přirozených čísel v popisu spekter atomů nebo kvantování energie při výkladu spekter spojitých, pokaždé se ohlašoval nový fyzikální rozměr světa. Jeho hranice určuje hodnota veličiny akce či momentu hybnosti či součinu v dané situaci relevantní energie a relevantního času: pokud se tyto přiblíží k Planckově konstantě, jsme nuceni bezpečný terén klasických představ opustit.

Hertzovy pokusy z roku 1887 dokazovaly, že elektron se s povrchu kovu uvolňuje snadněji, pokud jej nasvítíme (u alkalických kovů stačí i světlo z viditelné oblasti spektra) UV zářením. Nebylo přitom jasné, proč vznik jevu nepodmiňuje intenzita světla a proč naopak závisí na jeho vlnové délce. Einstein vysvětlil jev průhledně využitím kvantové hypotézy a světelného kvanta: elektron toto kvantum (od r. 1926 se užívá slovo *„foton"*) pohltí, jeho energie mu umožní překonat výstupní práci W_{v} a přebytkem pak elektron disponuje v podobě kinetické energie:

$$hf = W_{\mathrm{v}} + \frac{1}{2}mv^2. \tag{27}$$

To je slavná rovnice fotoelektrického jevu, za jehož výklad byl Einstein roku 1921 oceněn Nobelovou cenou. Přesné Millikanovo měření navíc dovolilo určit i hodnotu Planckovy konstanty, viz Úloha 17.

Einstein ve slavném roce 1905 mimo jiné nejen objasnil výměnu energie při absorpci či emisi záření, ale zároveň podal základy speciální teorie relativity. Své světelné kvantum (dále foton) tedy vybavil veličinami, na něž jsme zvyklí při popisu částic. Z energie fotonu $h \cdot f$ vyvodil jeho hmotnost

$$m = \frac{E}{c^2} = \frac{hf}{c^2} = \frac{h}{c\lambda} \tag{28}$$

i hybnost

$$p = mc = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}. \tag{29}$$

Jakmile se kvantová hypotéza ve fyzikálním prostředí etablovala, začaly pokusy využít ji i k výkladu jevů spojených s pohybem elektronu v atomu. Především je zřejmé, že moment hybnosti L v Thomsonově, resp. Rutherfordově modelu (vodíkového) atomu je řádově roven Planckově konstantě h: pro $r \simeq 10^{-10}$ m, $m \simeq 10^{-30}$ kg, $v \simeq 10^6$ m $\cdot$ s^{-1} je $L = r \cdot mv \simeq 10^{-34}$ J $\cdot$ s. Z toho plyne, že atom není klasický systém. Ještě před Rutherfordovými experimenty podal A. E. Haas návrh, jak odvodit rozměr atomu (hodnota $r \simeq 10^{-10}$ m byla odvozena z experimentu, totiž ze znalosti ionizační práce atomu, viz Příklad 3).

Příklad 11 – rozměrový model atomu

Odhadněme na základě rozměrové analýzy rozměr vodíkového atomu z předpokladu, že se na něm už uplatňuje kvantová hypotéza.

Řešení

Obíhá-li elektron kolem jádra rychlostí v, je jeho energie řádu mv^2 a charakteristická doba oběhu činí $t \simeq \frac{r}{v}$. Moment hybnosti L či součin charakteristické energie a času činí tedy $r \cdot mv$ a nesmí řádově přesahovat h. Odtud $v \simeq \frac{h}{mr}$ a energie činí řádově

$$E \simeq \frac{h^2}{mr^2}, \tag{30}$$

kde r je rozměr atomu.

Později ještě vyvodíme vztah (30) pro jednoduchý případ řádněji, ale za pozornost stojí už nyní: se zmenšujícími se rozměry prostředí vzrůstá rychle energie částice v něm uzavřené. Rozměrový odhad pak uvážil, že podstata této energie je elektrostatická a tedy řádu $\frac{1}{\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$, což srovnáním dává

$$r \simeq \frac{\varepsilon_0 h^2}{me^2}. \tag{31}$$

Číselně $r = \frac{8{,}85 \cdot 6{,}63^2}{9{,}1 \cdot 1{,}60^2} 10^{-12-68+31+38}\ \mathrm{m} \doteq 2\ \text{Å}$.

Model sice nevypovídá o struktuře atomu, ale řádově správně předpovídá hodnoty pohybu elektronu a především se neopírá o empirická data. Lze jej považovat za předchůdce modelu Bohrova. Když o něm na Solvayově konferenci fyziků v Bruselu roku 1911 referovali, byl přijat příznivě.

3.4 Bohrův model atomu

Roku 1913 vystoupil Niels Bohr s návrhem, který řešil potíže se stabilitou Rutherfordova modelu atomu. Jeho principy lze podat takto:

1. Rutherfordův model je správný.
2. Spektrální čáry atomu vytváří atom sám a za vznik jednotlivé čáry je zodpovědný jediný elektron, a to dvěma svými stavy, tzv. *dovolenými stacionárními stavy,* v nichž elektron nevyzařuje.
3. Dovolené stavy jsou charakterizovány diskrétními hodnotami momentu hybnosti dle rovnice
$$L = \frac{nh}{2\pi}, \tag{32}$$
kde h je Planckova konstanta, n přirozené číslo.
4. Planckova-Einsteinova rovnice $\varepsilon = hf$ se uplatňuje při emisi i absorpci: přechod elektronu mezi dvěma stavy s energiemi E_1, E_2 je provázen pohlcením, resp. vysláním světelného kvanta (fotonu) o frekvenci
$$f = \frac{E_1 - E_2}{h}. \tag{33}$$

Všechny potřebné parametry tohoto postulovaného atomu snadno dopočítáme.

Příklad 12 – parametry Bohrova atomu

Určeme poloměry povolených drah a energií, moment hybnosti a rychlost na každé dráze.

Řešení

Vedle rovnice (13) a (14) máme díky Bohrovu postulátu (32) ještě druhou rovnici
$2\pi r \cdot mv = nh$, odkud řešením dostaneme vztahy

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \cdot n^2, \tag{34a}$$

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \tag{34b}$$

$$v_n = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} \cdot \frac{1}{n}, \tag{34c}$$

a samozřejmě $L_n = \dfrac{nh}{2\pi}$.

Ze vztahu (34b) lze bezprostředně vypočítat ionizační práci vodíkového atomu, viz Úloha 18. Potvrzených $W_\mathrm{i} = 13{,}6$ eV znamená, že poloměr první Bohrovy dráhy se bude shodovat s Rutherfordovým výpočtem (15): $r_1 = 0{,}529$ Å. Hodnota se nazývá *Bohrův poloměr atomu.* Pro další dráhy pak tedy platí

$$r_n = n^2 \cdot 0{,}529 \text{ Å}, \tag{35a}$$

což je zjištění důležité pro odhad rozměru atomů s vyšším atomovým číslem.

Podobně lze pro energie elektronu na vyšších drahách psát

$$E_n = -\frac{13{,}6 \text{ eV}}{n^2} \tag{35b}$$

a odtud z Bohrova vztahu (33) vypočítat vlnové délky záření, které je při přechodu mezi jednotlivými hladinami pohlcováno, resp. vysíláno, viz Úloha 20.

A konečně rychlosti klesají podle vztahu

$$v_n = \frac{2{,}18 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}}{n}. \tag{35c}$$

Nezodpovězenou otázkou ovšem zůstává původ Bohrovy kvantující podmínky (32). Rozměr Planckovy konstanty sice napovídá, že kvantována by měla být veličina rozměru momentu hybnosti, avšak úplně samozřejmé to není, neboť jediný příklad, k němuž se dosud můžeme odvolat, je použití Planckovy-Einsteinovy hypotézy pro soubor ocilátorů, ale pro něj se traduje spíš kvantování energie: $E = n \cdot hf$. Dále není zřejmé, proč podmínka (32) obsahuje číslo 2π či jakékoli jiné.

Jednou z odpovědí, viz Úloha 20, je rozbor výsledků jiné volby – prostě by se neshodovala předpovězená spektra, což byl velký úspěch Bohrova modelu, alespoň pro vodíkový atom, popř. pro spektra alkalických kovů, které vodík připomínají. Model byl ale neúspěšný již u helia a jinde. Pokusíme se proto vysledovat kořeny rovnice (32) hlouběji.

Jedním z největších odkazů, jaké dynamický barokní duch zanechal fyzice, jsou nejen Newtonovy pohybové zákony, ale i matematický formalismus, jenž se jich chopil a zobecnil je.

Následujícím řádkům rozumějme takto: jsou tištěny drobným písmem – tím chceme naznačit jejich povahu spíše uvádějící a ilustrující; v úlohách FO se řešitelé s Lagrangeovým formalismem nesetkají. Tištěny nicméně jsou – nabízejí totiž sice zjednodušený, ale přece jen vhled do zobecnění Newtonových rovnic dodnes uchvacujícího i krásou i nečekanou schopností obstát při popisu jevů elektromagnetických, relativistických a kvantových, a přemostit tak Newtonovu zkušenost 17. století s moderní fyzikou Einsteina, Bohra či Diraca.

Základní dynamické veličiny, pro nás běžné souřadnice x, y, z kartézské soustavy, jim odpovídající složky vektoru rychlosti $\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$, $\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}$, $\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}$ (pro stručnost zapisované s tečkou v podobě $\dot{x}$, $\dot{y}$, $\dot{z}$), resp. hybnosti p_x, p_y, p_z, jsou v tzv. Lagrangeově formalismu zobecněny na tzv. *zobecněné souřadnice* q (takovou je např. úhlová dráha při kruhovém pohybu) a jim odpovídající *zobecněné rychlosti* $\dot{q}$ a *zobecněné hybnosti* p. V těchto proměnných je vyjádřena kinetická energie soustavy T, potenciální energie V a také celková energie $T + V$. Té se říká *hamiltonián* a značí se $\mathcal{H}$. Zvláštní, významnou roli hraje ještě jiná funkce, takzvaný *lagrangián* $\mathcal{L}$, definovaný rozdílem obou složek energie: $\mathcal{L} = T - V$, viz zmínka na str. 21, při definici akce $\mathcal{S} = \int_0^t \mathcal{L}\,\mathrm{d}\tau$. Jedním z vrcholů tohoto zobecňujícího postupu jsou tzv. *Lagrangeovy rovnice*, u soustav s jedním parametrem je rovnice jedna

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}. \tag{36}$$

Poznámka:
Symbol ∂ označuje tzv. parciální, dílčí derivaci, totiž právě jen podle proměnné označené ve spodní části piktogramu, kdežto ostatní proměnné jsou chápány jako nezávislé. Např. pro $f = x + yz^2$ je

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = z^2, \quad \frac{\partial f}{\partial z} = 2yz.$$

I jen letmý, nezasvěcený pohled na celkové obrazové vyznění rovnice s novými křivolakými písmeny nechává tušit ono napětí barokní dynamiky: pohybové, silové rovnice $m\boldsymbol{a} = \boldsymbol{F}$ jsou vyneseny do bezčasí lagrangiánu, pohyb je ukryt za změnou v souřadnici. Jako bychom pozorovali žebřík opřený o zeď chvilku předtím, než začne padat.

Příklad 13 – Lagrangeova rovnice

Vyřešíme Lagrangeovu rovnici pro závaží na pružině.

Řešení

Zobecněnou souřadnicí q může zůstat výchylka závaží z rovnovážné polohy, zobecněnou rychlostí $\dot{q}$ je obyčejná rychlost závaží při pohybu. Pak

$$T = \frac{1}{2}m\dot{q}^2, \quad V = \frac{1}{2}kq^2, \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}kq^2,$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = -kq, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}, \text{ (tedy } mv \text{ – zobecněná hybnost)}$$

a rovnice (36) dosazením získá tvar

$$-kq = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\dot{q}) = m\ddot{q}, \quad \text{tedy} \quad \ddot{q} = -\frac{k}{m}q.$$

To je známá rovnice harmonického pohybu s řešením $q(t) = a\sin\omega t + b\cos\omega t$, kde $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, konstanty a, b určíme z počátečních podmínek.

Hodnota formalismu nastíněného Lagrangeovou rovnicí (36) a zobecněného C. Jakobim a W. R. Hamiltonem spočívá v tom, že je použitelný i v nové situaci. Tou byla v 19. století teorie elektromagnetického pole, na počátku 20. století pak popis atomových jevů. V obou případech je cítit, že Newtonova pohybová rovnice $\boldsymbol{F} = m\boldsymbol{a}$ je příliš speciální a pro nové jevy nevhodná.

Pokusíme se tedy nyní prozkoumat původ Bohrovy kvantové rovnice (32) v novém jazyce. Je především vidět, že součin $p \cdot q$ zobecněných veličin si zachovává rozměr momentu hybnosti, viz Úloha 21. Proto pro nás tato dynamická veličina bude klíčová. Zkoumejme ji přitom v prostředí, odkud vyšla myšlenka kvantování – v problému harmonického oscilátoru.

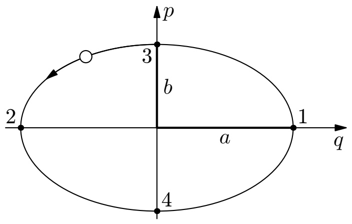
Součin $p \cdot q$ má řádově význam velikosti obsahu plochy pod křivkou p v závislosti na souřadnici q. To není umělá myšlenka – v klasické fyzice se vývoj dynamické soustavy celkem běžně převádí na pohyb geometrického bodu v tzv. *fázovém prostoru* proměnných p, q. V případě harmonického oscilátoru je navíc toto zobrazení názorné: Volíme-li za zobecněnou souřadnici výchylku oscilátoru z rovnovážné polohy, pak zřejmě platí

$$\mathcal{H}(p,q) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kq^2 = konst = E,$$

kde k je tuhost oscilátoru a E jeho celková energie. Rovnici přepíšeme názorněji:

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{2E/k} = 1.$$

Grafem této závislosti je elipsa s poloosami $a = \sqrt{\frac{2E}{k}}$, $b = \sqrt{2mE}$ (obr. 12). Jakýkoli oscilátor (korková zátka na hladině vody, závaží na pružině, elektron v Thomsonově modelu) lze tedy zobrazit, přičemž časový průběh jeho chování je popsán bodem na elipse. Body 1, 2 odpovídají největší výchylce a nulové rychlosti, naopak body 3, 4 odpovídají průchodu rovnovážnou polohou.



Obr. 12 Zobrazení pohybu harmonického oscilátoru ve fázovém prostoru (q, p)

Obsah plochy pod křivkou $p = p(q)$ (obecně objem fázového prostoru vymezený pohybovou rovnicí soustavy) je zde řádově $p \cdot q$, přesně však

$$S = \pi q_{\max} \cdot p_{\max} = \pi \sqrt{\frac{2E}{k}} \cdot \sqrt{2mE} = \frac{2\pi E}{\omega} = \frac{E}{f},$$

kde f je frekvence harmonického pohybu oscilátoru. Planck u harmonického pohybu nemohl kvantovat moment hybnosti, neboť ten je doslovně nulový, ale – jak vidíme – – kvantoval výraz $\frac{E}{f}$!

Slavný postulát $E = n \cdot hf$ je lépe nahlížet ve tvaru

$$\frac{E}{f} = n \cdot h, \tag{37}$$

anebo ještě obecněji

$$\oint p\mathrm{d}q = n \cdot h, \tag{38}$$

kde n je přirozené číslo a $\oint$ znamená součet (integrál) přes celý objem uzavíraného fázového prostoru.

Příklad 14 – Vyvození Bohrovy podmínky

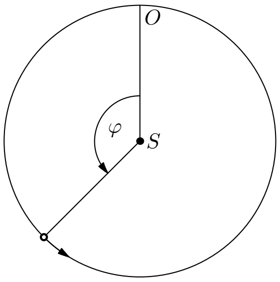
U kruhového pohybu (elektronu kolem jádra) je užitečnou zobecněnou souřadnicí q úhel φ, azimut, jímž je poloha bodu na kružnici jednoznačně určena (obr. 13). Zobecněnou rychlostí $\dot{q}$ je tedy veličina $\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$, tj. úhlová rychlost ω kruhového pohybu. Dále

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mr^2\dot{q}^2, \qquad V = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r},$$

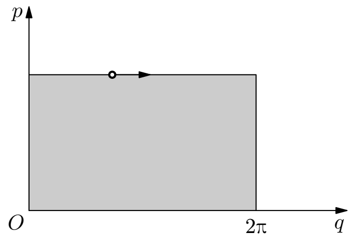
takže lagrangián

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}mr^2\dot{q}^2 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

a zobecněná hybnost $p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = mr^2\dot{q}$ má význam momentu hybnosti elektronu. Křivka $p = p(q)$ ve fázovém prostoru je konstantní přímka $p = konst$ (obr. 14).



Obr. 13 Poloha bodu na kružnici



Obr. 14 Zobrazení rovnoměrného pohybu po kružnici ve fázovém prostoru (p, q)

Plošný obsah vymezené křivky činí

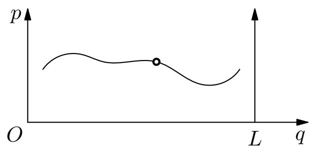
$$\oint p\mathrm{d}q = \int\limits_0^{2\pi} mr^2\dot{q}\,\mathrm{d}q = mr^2\dot{q}\cdot 2\pi = 2\pi mr^2\omega = 2\pi mrv.$$

Když ovšem tuto veličinu budeme kvantovat v duchu Planckovy-Einsteinovy hypotézy, získáme rovnici (32)!

To je úspěch, který stojí za pozornost. Než Bohrův model vylepšíme, zkusme kvantovou podmínku (38) využít k předpovědi chování jednoduchého systému – např. volné částice mimo silová pole, ale uvězněné v jednorozměrném prostředí délky L.

Příklad 14 – Potenciálová jáma 1

Přirozenou souřadnicí je tu vzdálenost x od počátku (např. levé stěny v obr. 15), pak $\dot{q} = v$ je rychlost částice, $\mathcal{L} = T = \dfrac{1}{2}m\dot{q}^2$ a $p = \dfrac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}}$ vyjde obyčejná hybnost částice mv.



Obr. 15 Částice v potenciálové jámě

Podmínka podvazující chování volné částice (samozřejmě tehdy, pokud $p\cdot q \approx h$, viz Úloha 14) zní

$$\oint p\,\mathrm{d}q = 2\int\limits_0^L mv\,\mathrm{d}x = nh.$$

Jelikož mv je konstantní, máme podmínku $2mvL = nh$. Odtud jednak kvantujeme možné rychlosti: $v_n = n\cdot\dfrac{h}{2mL}$, jednak i energie:

$$E_n = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{h^2}{8mL^2}\cdot n^2. \tag{39}$$

Vztah jsme komentovali při rozměrovém odhadu velikosti atomu, viz (30), a později jej objevíme znovu.

S kvantovými podmínkami (38) přistoupil roku 1915 k atomu vodíku ve snaze zdokonalit jednoduchý Bohrův model také A. Sommerfeld.

3.5 Sommerfeldův model atomu

Spektrální čáry atomu vodíku ve skutečnosti nejsou jednoduché, ale vykazují vnitřní strukturu, což Bohrův model neuměl vysvětlit. A. Sommerfeld proto Bohrovo řešení, omezující se jen na kruhové dráhy, rozšířil o představu, že jako jsou u gravitačního problému dvou těles možné i dráhy eliptické, i zde se elektrony mohou pohybovat po elipsách. Formálně je úloha stejná, sílu $\frac{\varkappa M \cdot m}{r^2}$ nahrazuje síla $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e \cdot e}{r^2}$. Zatímco pohyb po kružnici je určen dvěma parametry, např. poloměrem r a obvodovou rychlostí $v = \frac{2\pi r}{T}$, viz rovnice (13) a (32), potřebujeme k určení tří parametrů (např. velikosti hlavní poloosy a, vedlejší poloosy b a doby oběhu T) tři rovnice. První bude zobecněním rovnice (13), druhé dvě zobecní kvantovou podmínku (32).

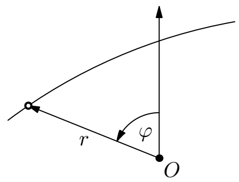
Do rovnice (13) upravené do keplerovského tvaru

$$\frac{r^3}{T^2} = \frac{e^2}{16\pi^3\varepsilon_0 m}$$

vpravíme informaci o poloosách elipsy skrze plošnou rychlost $w = \frac{\pi ab}{T}$, kde poloměr r kruhové dráhy nahradíme velikostí hlavní poloosy a. Po úpravě vyjde

$$\frac{a}{b^2} = \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 m w^2}. \tag{40}$$

Zobecněnými souřadnicemi u pohybu v rovině jsou tradičně azimut φ a vzdálenost r (zde od středu elipsy, viz obr. 16), tedy $q_1 = \varphi$, $q_2 = r$.



Obr. 16 Poloha bodu na ploše

Zobecněné rychlosti jsou pak $\dot{q}_1 = \dot{\varphi} = \omega$, tj. úhlová rychlost, $\dot{q}_2 = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}$. Kinetická energie $T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left(v_\varphi^2 + v_r^2\right)$, takže lagrangián dává

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}mr^2\dot{q}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{q}_2^2 + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Zobecněné hybnosti vycházejí takto:

azimutální $p_1 = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_1} = mr^2\dot{q}_1 = mr^2\omega$,

radiální $p_2 = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_2} = m\dot{q}_2 = m \cdot \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}$.

Nyní sestavíme kvantové podmínky. Azimutální je snadná: Ježto jedinou působící silou je centrální síla elektrostatická, jejíž moment je nulový, zůstává moment hybnosti $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$, i plošná rychlost $\boldsymbol{w} = \frac{1}{2}\boldsymbol{r} \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}$ konstantní (2. Keplerův zákon). Pak

$$\oint p_1 \mathrm{d}q_1 = \int_0^{2\pi} mr^2\omega \,\mathrm{d}\varphi = \int_0^{2\pi} L \,\mathrm{d}\varphi$$

a podmínka zní

$$L = mr^2\omega = n_1 \cdot \frac{h}{2\pi}, \tag{41φ}$$

kde n_1 je přirozené číslo. Podmínka je shodná s Bohrovou podmínkou (32) pro kruhové dráhy.

Vyčíslit integrál $\oint p_2 \mathrm{d}q_2 = \oint m\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{d}r$ je obtížnější, r se v čase mění, spokojíme se pro tuto chvíli s výsledkem. Tím je výraz $2\pi L\frac{a-b}{b}$ a kvantová podmínka zní

$$L\frac{a-b}{b} = n_2 \cdot \frac{h}{2\pi}. \tag{41r}$$

Ze tří podmínek (40), (41φ), (41r) nyní určíme parametry pohybu elektronu v Sommerferdově eliptickém modelu. Z kvantových podmínek (41) najdeme vztah mezi délkami polos:

$$\frac{a-b}{b} = \frac{n_2}{n_1}, \qquad \frac{a}{b} = \frac{n_1+n_2}{n_1} = \frac{n}{n_1}. \tag{41ab}$$

Součet azimutálního a radiálního čísla nazveme *hlavním kvantovým číslem* n, pro n_1 zřejmě platí $n_1 = 1, 2, \ldots, n$.

Spolu s rovnicí (40) pak získáme

$$a = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} n^2, \tag{42a}$$

$$b = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} n n_1, \tag{42b}$$

kde jsme vyjádřili w pomocí L: $w = \frac{L}{2m}$ a moment hybnosti znovu kvantovali podmínkou (41φ). Rovnice (42a) je shodná s rovnicí (35a) – délka hlavní poloosy je rovna poloměru Bohrovy dráhy. Sommerferdovo hlavní kvantové číslo je shodné s Bohrovým kvantovým číslem n, a také vztah pro energii elektronu zůstává zachován, viz (34b):

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Energie závisí jen na hlavním kvantovém čísle n, resp. jen na délce a hlavní poloosy:

$$E = -\frac{1}{2}\,\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\,\frac{e^2}{a}. \tag{43}$$

Podíl $\frac{a}{b} = \frac{n}{n_1}$ dále ukazuje, že poměr délek poloos je určen podílem přirozených čísel. Přehledně dává Sommerfeldovy výsledky Tabulka 1:

Tab. 1 Parametry eliptických drah elektronů

Kvantová čísla		Polosy		Tvar	Označení
hlavní	azimutální	velká	malá	dráhy	dráhy
$n = 1$	$n_1 = 1$	r_1	r_1	kružnice	1s
$n = 2$	$n_1 = 1$	$4r_1$	$2r_1$	elipsa	2s
	$n_1 = 2$	$4r_1$	$4r_1$	kružnice	2p
$n = 3$	$n_1 = 1$	$9r_1$	$3r_1$	elipsa	3s
	$n_1 = 2$	$9r_1$	$6r_1$	elipsa	3p
	$n_1 = 3$	$9r_1$	$9r_1$	kružnice	3d
atd.					

Sommerfeld podal první pokus o teoretické zdůvodnění bohatší struktury spekter. Dnešní značení drah přiřadilo zavedeným symbolům s (sharp), p (principal), d (diffuse), f (fundamental), …jiné hodnoty kvantových čísel (viz později).

Přestože rychlost elektronu ve vodíkovém atomu je v porovnání s rychlostí světla malá, $v/c < 1$ %, Sommerfeld relativistický efekt započítal a podařilo se mu jednak ukázat, že sama eliptická dráha, po níž elektron obíhá, se stáčí konstantní úhlovou rychlostí, takže elektron obíhá spíše po růžicové dráze, jednak vyvodil, že energie není dána jen hlavním kvantovým číslem, ale s rostoucím azimutálním číslem n_1 mírně roste.

Sommerfeldův model se pokusil vypořádat i s dalším jevem, jímž je štěpení spektrálních čar atomů v magnetickém poli, jak je roku 1895 prvně pozoroval P. Zeeman.

Jak již u Thomsonova modelu připomněla Úloha 1, vytváří obíhající elektron proudovou smyčku s magnetickým momentem

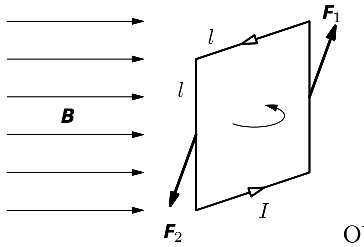
$$\boldsymbol{m} = I\boldsymbol{S} = -\frac{e\boldsymbol{S}}{T} = -e\boldsymbol{w} = -\frac{e}{2m}\boldsymbol{L},$$

kde $\boldsymbol{S}$ je vektor plochy smyčky, T oběžná doba elektronu a $\boldsymbol{w}$ vektor plošné rychlosti. Moment hybnosti $\boldsymbol{L}$ je ovšem kvantován podmínkou (41φ), takže platí $m = \frac{eh}{4\pi m} \cdot n_1$, kde veličina

$$\mu_\mathrm{B} = \frac{1}{2}\,\frac{e}{m} \cdot \frac{h}{2\pi} \tag{44}$$

se nazývá *Bohrův magneton* s významem kvanta magnetického momentu, číselně $\mu_\mathrm{B} = 0{,}928 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{A \cdot m^2}$.

Jak ukázaly pokusy s průletem atomů nehomogenním magnetickým polem, kvantována není jen velikost magnetického momentu proudové smyčky (elektronové dráhy), ale také její směr. V homogenním magnetickém poli je proudová smyčka jen stáčena, avšak není vychylována kolmo na směr magnetické indukce, viz obr. 17, neboť $F_1 = BIl = F_2$. Avšak v příčně nehomogenním poli je $B_1 \neq B_2$, tedy $F_1 \neq F_2$ a smyčka (s ní celý atom) je vychylována do strany, přičemž výsledná výchylka závisí na orientaci smyčky vzhledem k orientaci vektoru $\boldsymbol{B}$. Měření ukázalo příčnou stopu nikoli spojitou, nýbrž sestávající z několika skvrn. To bylo důkazem, že je nutno kvantovat i směr magnetického momentu, resp. momentu hybnosti.



Obr. 17 Proudová smyčka v magnetickém poli

Sommerfeld aplikací obecné kvantové podmínky (38) vyvodil pro možné odchylky α elektronové dráhy od směru vnějšího magnetického pole vztah

$$\cos\alpha = \frac{n_3}{n_1}, \tag{45}$$

kde n_3 zavedl jako třetí, tzv. *magnetické* kvantové číslo. Zřejmě je možné $n_3 = 0$ a s ohledem na smysl vztahu lze i $n_3 = \pm 1,\ \pm 2$, atd., nejvýše však $n_3 = \pm n_1$. Možné hodnoty průmětu $\boldsymbol{m}$, resp. $\boldsymbol{L}$ do směru pole (obvykle se volí osa z) jsou tedy

$$L_z = L\cos\alpha = \frac{n_1 h}{2\pi} \cdot \frac{n_3}{n_1} = \frac{n_3 h}{2\pi}. \tag{46}$$

Když se nyní elektronová dráha coby proudová smyčka vyskytne ve vnějším magnetickém poli, přísluší jí (dle vzájemné orientace $\boldsymbol{L}$ a $\boldsymbol{B}$) navíc energie magnetické interakce $\Delta E = -\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B} = \dfrac{e}{2m}\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{B}$, což s ohledem na (46) dává

$$\Delta E = n_3 \cdot \mu_{\mathrm{B}} \cdot B. \tag{47}$$

V magnetickém poli tedy Sommerfeld předjímal rozštěpení energií (dosud závislých jen na hlavním kvantovém čísle n) na celkem $2n_1 + 1$ hladin, vzájemně vzdálených o μ_{B}. To by znamenalo obrovský vzrůst počtu všech možných přechodů elektronů, čemuž ale zabránil přijetím podmínky, aby se magnetické kvantové číslo při přechodu elektronu změnilo nejvýš o jednu:

$$\Delta n_3 = 0, \pm 1. \tag{48}$$

Sommerfeld tuto podmínku neobjasnil (to dokázala kvantová mechanika) a celkově jsou magnetické vlastnosti atomů ne v souladu s předpověďmi Bohrovy-

Sommerfeldovy teorie (nevysvětleny zůstaly např. dublety, jež vykazuje většina čar), ale i tak se s poloklasickou teorií rozloučíme s úctou a obdivem. Úloha celostátního kola 48. ročníku slovenské FO nesla název *„Sommerfeldov model atómu vodíku"* a v zadání ji autor, prof. Ivo Čáp doprovodil slovy:

„Vysvetlenie stavby a dynamiky atómu priniesla až moderná kvantová teória, ale uvedené pokusy o vysvetlenie v tej dobe kvalitatívně nových javov patria do zlatého fondu histórie ľudského poznania."

Jedním z požadavků, které má každá nová teorie splňovat, je schopnost přejít v tradiční, klasickou teorii v těch oblastech, kde se stará teorie osvědčila. Takto např. přecházejí předpovědi speciální teorie relativity v klasickou limitu pro malé rychlosti pohybujících se předmětů, $v \ll c$, nebo Planckova kvantová teorie záření přejde v klasickou předpověď v dlouhovlnné oblasti, tj. pro $hf \ll kT$.

Při hledání kvantitativní podmínky, při jejímž splnění by se měly Bohrovy kvantové předpoklady shodovat s klasickou teorií, mějme na paměti ústřední rys popisovaného světa: je to *mikrosvět.* Nepochybíme tedy, budeme-li cestu od Bohrova modelu atomu ke klasickým výsledkům hledat v rovnici (34a): atom se bude chovat „klasicky", bude-li velký (např. milimetrový) tedy v přiblížení velkého kvantového čísla n.

Příklad 16 – princip korespondence

Ověřme, zda pro kvantová čísla $n \gg 1$ předvídá Bohrova teorie frekvence vyzařování shodně s klasickou teorií elektromagnetickou.

Řešení

Klasická teorie vyvozuje, že atom coby elektromagnetický oscilátor bude vysílat záření o frekvenci rovné frekvenci oběhu elektronu kolem jádra:

$$f = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m r^3}}, \quad \text{viz též Úloha 1.}$$

Přitom $r = r_1 \cdot n^2$, kde Bohrův poloměr je dle (34a)

$$r_1 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}, \ \text{ takže dosazením } \ f(n) = \frac{me^4}{4\varepsilon_0^2 h^3}\,\frac{1}{n^3}.$$

V Bohrově modelu tato veličina nemá smysl, neboť frekvence záření v něm nejsou určeny stavem (ve stacionárních stavech elektron nezáří), nýbrž přechodem mezi stavy. Vypočítejme tedy dle Bohrova postulátu (33) frekvenci $f = \frac{1}{h}(E_{n+1} - E_n)$ pro $n \gg 1$. Po dosazení z (34b) skutečně dostaneme

$$f = \frac{1}{h}\cdot\frac{me^4}{8\varepsilon_o^2 h^2}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right) \approx f(n),$$

kde jsme použili aproximaci $\dfrac{(n+1)^2 - n^2}{n^2(n+1)^2} \approx \dfrac{2n}{n^4} = \dfrac{2}{n^3}$.

Shoda je dobře představitelná: pro velká n jsou energie, původně přísně oddělené, již tak nahuštěny, že spektrum povolených stavů je v podstatě spojité, ke spokojenosti klasické teorie. Jakmile jsme však v atomu skutečném, s elektronem, jehož moment hybnosti má hodnotu srovnatelnou s Planckovou konstantou h, tedy u malých kvantových čísel, platí Bohrovo varování:

„Musíme se vzdát všech pokusů vysvětlit klasickým způsobem chování elektronu při přechodu z jednoho stacionárního stavu do druhého.“

Než se dotkneme světa kvantové mechaniky, zmiňme se vedle Bohrova *principu korespondence* ještě o jedné myšlence, která pomáhá navazovat nové představy na klasickou zkušenost, totiž o konceptu *elektronových vln.*

Roku 1924 přišel L. de Broglie s originální myšlenkou, podle níž s každou volnou částicí o hybnosti p je spojena určitá vlna. Směr jejího šíření je shodný se směrem vektoru $\boldsymbol{p}$ a vlnová délka je určena vztahem

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{49}$$

Formálně je vztah shodný s Einsteinovým vztahem (29) pro hybnost fotonu, ale samotná hypotéza je naprosto originální a zprvu byla považována za kuriozitu. De Broglie však jen dokončil z druhé strany dílo započaté Einsteinem (ten myšlenku přijal příznivě), totiž myšlenku dvojí povahy, *dualismu* jsoucna *částice – vlna.* V nobelovské přednášce roku 1929 říká:

„Určení pohybu elektronů v atomu vede k zavedení celých čísel. Dosud jedinými jevy, u nichž se ve fyzice uplatňují celá čísla, byly interferenční jevy a vibrační stavy. To mi vnuklo myšlenku, že elektrony není možno nahlížet jako pouhé částice, ale že je jim nutno přisoudit také periodický charakter.“

A jako musely na své objevení čekat částicové vlastnosti světla, čekal de Broglie do roku 1927, kdy Davison a Germer potvrdili vlnové vlastnosti elektronových svazků pozorováním interference při *rozptylu elektronů na krystalu,* viz Úloha 24.

Myšlenku elektronových vln uplatníme v již známé fyzikální situaci – v případě volné částice uzavřené do jednorozměrného prostoru, jejž nemůže opustit.

Příklad 17 – potenciálová jáma 2

Představu vlny postupující s pohybem volné částice nahradí v uzavřeném prostředí vlnění *stojaté,* tedy zvláštní druh kmitavého stavu s uzly, stopami po odrazu postupné vlny na stěnách potenciálové jámy (obr. 18). Pro n-tý kmitavý stav platí

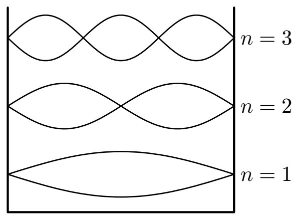
$$L = n \cdot \frac{\lambda}{2}, \tag{50}$$

odkud vidíme, jak budou všechny dynamické veličiny elektronu kvantovány:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}, \tag{51a}$$

$$p_n = \frac{nh}{2L}, \tag{51b}$$

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} \cdot n^2. \tag{51c}$$



Obr. 18 Elektronové vlny v jednorozměrné potenciálové jámě

Potvrdili jsme tedy vztah (39), ale tentokrát si výsledků všimneme pozorněji. Především je vidět, že částice v krabici nemůže být v klidu, $E > 0$! (Zobecnění na 3 rozměry situaci kvalitativně nezmění.) Pro elektron uzavřený v prostoru rozměru atomu, dejme tomu $L \simeq 1$ Å, vychází energie základního stavu $E_1 = 60 \cdot 10^{-19}$ J $= 38$ eV! Hybnost takového elektronu má velikost $3{,}3 \cdot 10^{-24}$ kg $\cdot$ m $\cdot$ s^{-1} a odpovídající vlnová délka $\lambda_1 = 2$ Å, což skutečně problematizuje představu elektronu coby částice. Jeho rychlost bude $v = \dfrac{p}{m} = 3{,}6 \cdot 10^6$ m $\cdot$ s^{-1} – to má do klasického klidu daleko. Připomeňme, že v klasickém termodynamickém souboru mnoha částic, např. molekul v plynu, kde na jednu částici připadá střední energie $E = \dfrac{3}{2}kT$, odpovídá 38 eV teplotě $T = \dfrac{2E}{3k} = 2{,}9 \cdot 10^5$ K!

Významnou je závislost energie částice na velikosti prostoru, do něhož je uzavřena – se zmenšujícími se rozměry vzrůstá brizantnost poutaných energií. Takto lze zhruba srovnat energii uvolňovanou při chemických, resp. jaderných reakcích.

Příklad 18 – energie chemická a jaderná

Uvažme, že chemické reakce představují pohyby elektronů v rozměrech 10^{-10} m, zatímco jaderné procesy se týkají nukleonů a probíhají v jádře rozměrů 10^{-15} m až 10^{-14} m. Označíme-li parametry elektronu v atomu jako m, resp. l, a nukleonu a jádra jako M, resp. L, pak „Pandořino číslo“

$$p \equiv \frac{E_{\text{jad}}}{E_{\text{chem}}} = \frac{ml^2}{ML^2} \approx 10^{-30-19+27+29} = 10^7.$$

Z chemie si ještě pamatujeme tepelné zabarvení reakce – činí řádově eV, tedy 10^{-19} J, což vztaženo na mol vychází v desítkách kilojoulů, často postaru v kilokaloriích na mol. Jaderné reakce jsou daleko mocnější, uvolňují energie řádově MeV.

Příklad 19 – elektron v jádře

Myšlenka jaderných elektronů byla svého času přirozeným a jednoduchým nápadem, jak vysvětlit, proč jsou hmotnosti jader vždy s dobrou přesností celočíselným násobkem hmotnosti protonu (například u lehčích jader je to většinou $2Z$ násobek). Zdálo se rozumné předpokládat, že protonů je v jádře víc (aby souhlasila hmotnost jádra), že jsou však v jádře přítomny i elektrony, které svým nábojem odstíní přebývající náboj protonů. Myšlence navíc pomáhala skutečnost, že některá jádra při tzv. *přeměně beta* skutečně elektrony vysílají.

Jednoduchý výpočet však vede k pochybnostem. Elektron uzavřený v jádře rozměru $R \simeq 10^{-15} - 10^{-14}$ m bude mít energii $E \simeq 10^{-9}$ J, tedy desítky GeV. Jeho klidová energie $E_0 = m_0c^2$ činí jen 0,5 MeV, neboli takový elektron by byl silně relativistický s rychlostí velmi blízkou c a hmotností $m = E/c^2 =$ $=$ stovky m_0, $m \doteq \dfrac{m_\mathrm{u}}{8}$. Stejný výpočet pro proton dává energii 13 MeV, což je v porovnání s klidovou energií $m_\mathrm{u}c^2 = 930$ MeV tolik, že i pohyb protonů činí relativistickým s rychlostí $v = c\sqrt{1-\left(\dfrac{m_0}{m}\right)^2} = 0{,}17c$.

Jaderné elektrony by tedy s jadernými protony byly dynamicky ve stavu, který by dovoloval výměnu energie při srážkách, přičemž děje by probíhaly na úrovni GeV. Není pak jasné, proč by jaderné reakce, obecně procesy spojené s interakcí s jádrem, měly probíhat energeticky o dva řády níž.

Poznámka:

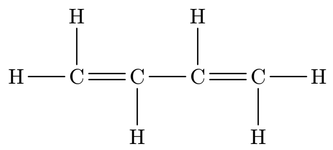
Tato námitka nebyla jediná. Není také jasné, proč by část elektronů zůstávala v obalu, energeticky na úrovni eV, a druhá část týchž elektronů by vstupovala do silné interakce uvnitř jádra s energiemi GeV.

Vážným argumentem byl dále fakt, že magnetický moment jádra má hodnotu srovnatelnou s momentem protonů, kdežto magnetický moment elektronu je o 3 řády větší.

Zajímavou a alespoň pro kvalitativní odhad účinnou je aplikace výsledků studia potenciálové jámy na výpočet spekter některých speciálních molekul.

Příklad 20 – spektrum butadienu

Butadien je molekulou s tzv. *konjugovanými vazbami:* jednoduchá vazba se střídá s dvojnou, což v rovině kolmé dovoluje elektronům v π-orbitalech překryv a poměrně volný pohyb v jednorozměrném koridoru vymezeném skeletem uhlíkových vazeb σ. Je-li střední délka vazby a, má butadienová potenciálová jáma délku $4a$, kde jsme na krajích molekuly počítali ještě přesah dráhy $0{,}5a$ do strany.



Obr. 19 Molekula butadienu

Energie elektronů v této jámě volně plujících je kvantována dle (51c). Volné elektrony (jsou čtyři, neboť k vazbě π přispívá každý atom uhlíku jedním elektronem) obsazují dovolené energetické hladiny od nejnižší výše, aby celková energie systému byla minimální. Každou hladinu obsadí dle Pauliho vylučovacího principu (ten vysvětlila až kvantová mechanika) dva elektrony. Tak se stane, že zaplněny jsou spodní dvě hladiny a přechod elektronů z tzv. HOMO (highest occupied molecular orbital) do tzv. LUMO (lowest unoccupied MO) se děje mezi hladinami s kvantovým číslem $n = 2$ a $n = 3$.

Energie takového přechodu činí

$$\Delta E = \frac{h^2}{8mL^2}(9-4) = \frac{5}{128}\,\frac{h^2}{ma^2}$$

a očekáváme, že molekula bude absorbovat v oblasti vlnové délky

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{128}{5}\,\frac{mc}{h}\cdot a^2.$$

Číselně pro $a = 1{,}455$ Å dostaneme $\lambda = 223$ nm.

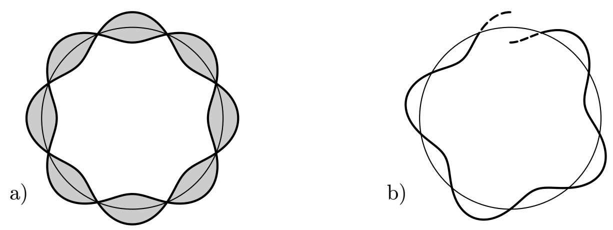
To je světlo z UV části spektra. Viditelné světlo tedy nemůže být molekulou absorbováno a butadien nebude mít barvu, neboť fotony viditelného záření nestačí na excitaci o 6 až 7 eV.

S výsledkem zároveň vidíme, že pokles excitační energie nastane se vzrůstem délky dráhy, tj. se zvětšením konjugovaného řetězce. Chemie v té souvislosti zavádí pojem *delokalizační energie* a vysvětluje tak rozmanité barvy rozlehlejších aromatických sloučenin, např. zelenou barvu chlorofylu, červenou barvu hemoglobinu nebo pestré barvy průmyslových organických barviv.

Myšlenku tzv. *volných elektronů* rozvinul v 50. letech minulého století J. R. Platt do ucelené důmyslné metody, jak poměrně jednoduchými prostředky vyšetřovat vlastnosti molekul s konjugovanými vazbami. Obecný problém výkladu atomových spekter a molekulových spekter nejen elektronových, ale i vibračních a rotačních musel ovšem čekat až na silnější nástroje kvantové mechaniky.

Rozlučme se s de Brogliovým konceptem částicových vln u problému, u něhož jsme začínali tuto kapitolu: u kvantování povolených, stacionárních stavů ve vodíkovém atomu Bohrově, resp. Sommerfeldově. Obrázky 20a,b znázorňují podmínku stacionárních drah kresbou a patří ke schématům právě tak jednoduchým, jako hlubokým a inspirujícím vědeckou intuici.

Stojaté vlnění uzavřené do obvodu smyčky (tj. de Brogliova vlna spojená s pohybem elektronu okolo jádra) v případě a) má vlnovou délku, jež umožní vzniknout časově neproměnnému kmitavému stavu; v případě b) se vlnění nesloží ve stacionární stav, podobně jako nenastane interference světla určité vlnové délky na tenké vrstvě určité konkrétní tloušťky, nebo jako se pružná obruč dané velikosti nerozkmitá na libovolné frekvenci.



Obr. 20 Kruhová smyčka a) utvoří; b) neutvoří trvalý kmitavý stav

Musí zřejmě platit geometrická podmínka

$$2\pi r = n \cdot \lambda, \tag{52}$$

kde n je přirozené číslo. Ta se ve světle de Brogliovy hypotézy $\lambda = \dfrac{h}{p}$ promění v Bohrovu dynamickou podmínku (32).

Je stěží uvěřitelné, že tak názorná a jednoduchá idea může nezkresleně popisovat ve skutečnosti tak problematickou situaci: pohyb elektronu v atomu je obecně trojrozměrný, kdežto naše schéma je jen projekcí do hlavní roviny atomové koule ..., a přece se to vyplatí.

S trochou odvahy (budeme ji mít příště) jsme mohli podmínku (52) zkusit i v eliptickém modelu Sommerfeldově pro každou z poloos. Z rovnic

$$2\pi a = n_a \lambda, \tag{52a}$$

$$2\pi b = n_b \lambda \tag{52b}$$

bychom vyvodili závěr (41ab) rychleji a možná věrohodněji.

3.6 Kvantověmechanický model atomu

Na přelomu 19. a 20. století pronikla experimentální fyzika k jevům, které oba tradiční rámce uvažování, totiž částicový a vlnový, usvědčovaly z nedokonalosti: realita mikrosvěta vyžadovala oba zjednodušující přístupy překlenout.

Přijetí myšlenky de Brogliových částicových vln má ve skutečnosti zásadní důsledky: alespoň v mikrosvětě, kde se vlnové a částicové jevy prolínají, již nevystačíme s Newtonovou pohybovou rovnicí, protože v ní na nic podobného není pamatováno.

Budovat most lze přirozeně s obou stran. Elegantní a náročná cesta vychází od částic, Newtonově pohybové rovnici $\boldsymbol{F} = m\boldsymbol{a}$ dá obecnější podobu v Lagrangeově (36) a Hamiltonově formalismu a ten přetvoří pro použití v mikrosvětě.

Zvolíme druhou cestu, jak jí v letech 1925 až 1926 šel E. Schrödinger (a ještě jinak W. Heisenberg): vyšel z de Brogliových vln coby reality (ověřené až o rok později!), takže východiskovou rovnicí mu byla tzv. *rovnice vlnová*

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \tag{53}$$

parciální diferenciální rovnice pro funkci $u = u(x, t)$ vyjadřující okamžitou výchylku vlnového procesu v daném místě x a čase t (zobecnění na tři rozměry je snadné); v je rychlost šíření vlnění.

Omezme se nyní na situace časově neproměnné – to nám umožní proměnné rozdělit a hledanou funkci vyjádřit ve tvaru $u(x, t) = \psi(x) \cdot \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} f t}$, kde $\psi(x)$ je tzv. *amplitudová funkce*. Po dosazení se rovnice zjednoduší na tvar

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{4\pi^2 f^2}{v^2}\psi. \tag{54}$$

Podíl rychlosti šíření vlny v a frekvence f dovoluje vnést do rovnice veličinu $\lambda = \frac{v}{f}$ a interpretovat ji záměrně jako vlnovou délku příslušející zkoumanému objektu. Tím se podaří to hlavní: skrze de Broglieův vztah $\lambda = \frac{h}{p}$ učiníme zkoumané vlny „hmotnými“ – rovnice již obsahuje hybnost. Zpravidla se ovšem hybnost vyjádří ze vztahu pro celkovou energii

$$E = \frac{p^2}{2m} + V,$$

kde $V(x)$ je potenciální energie objektu, nachází-li se v silovém poli. Po dosazení a úpravě dostáváme tzv. jednorozměrnou Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{1}{4\pi^2}\frac{h^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi = E\cdot\psi. \tag{55}$$

V trojrozměrném případě přibudou na levé straně stejné členy v proměnných y a z, vrátíme se k parciálním derivacím, zavedeme diferenciální operátor Laplaceův $\triangle \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, funkci $\psi(x)$ jedné proměnné zobecníme na funkci tří prostorových proměnných $\psi(x, y, z)$ a konečně zavedeme tzv. redukovanou Planckovu konstantu

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}054 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s}. \tag{56}$$

Tak dojdeme obecného tvaru slavné Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi + V\psi = E\psi. \tag{57}$$

Rovnice se často zapisuje ve tvaru

$$\widehat{H}\psi = E\psi, \tag{58}$$

kde operátor na levé straně se nazývá *hamiltonián* v souladu se jménem funkce $\mathcal{H}$ s významem celkové energie, viz str. 25. Zde $\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(x, y, z)$ představuje obdobně součet operátorů kinetické a potenciální energie.

Pro čtenáře, který není s vlnovou rovnicí (53) obeznámen, lze odvození Schrödingerovy rovnice jen naznačit sice zjednodušeně, ale o to důvtipněji. Vyjdeme z rovnice pro okamžitou výchylku $y(x, t)$ stojatého vlnění na struně, které je svou podstatou stacionárním stavům kvantových objektů velmi blízko:

$$y = y_m \sin\frac{2\pi x}{\lambda} \sin\frac{2\pi t}{T} = \psi(x) \cdot \sin\frac{2\pi t}{T}.$$

Jednotlivé hmotné body struny konají harmonický kmitavý pohyb, ale amplituda kmitů se podél struny mění podle tzv. amplitudové funkce

$$\psi(x) = y_m \sin\frac{2\pi x}{\lambda}.$$

Pak

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi.$$

a po dosazení $\frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2 p^2}{h^2} = \frac{8\pi^2 m}{h^2}\frac{1}{2}mv^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)$ dostaneme amplitudovou vlnovou rovnici

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + (V - E)\psi = 0,$$

kterou rozšíříme pro trojrozměrný prostor a zavedením Laplaceova operátoru upravíme na tvar (57)

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\triangle\psi + V\psi = E\psi.$$

Před dalším výkladem zkusme rovnici (57), resp. (55) použít na jednoduchých příkladech.

Příklad 21 – volná částice

Uvažujme volnou částici, směr jejího pohybu zvolme za směr osy x a řešme jednorozměrnou Schrödingerovu rovnici (55)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi,$$

neboť bez silového pole je $V =$ konst a lze volit $V = 0$.

Položíme-li $\dfrac{\hbar}{\sqrt{2mE}} = \dfrac{h}{2\pi p} = \dfrac{\lambda}{2\pi}$, přejde rovnice na tvar $-\dfrac{\lambda^2}{4\pi^2}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = \psi$ a řešení lze psát ve tvaru

$$\psi(x) = A\cdot\sin\frac{2\pi x}{\lambda} + B\cdot\cos\frac{2\pi x}{\lambda}, \tag{59}$$

nebo v komplexním tvaru

$$\psi = a\cdot\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}x}{\lambda}} + b\cdot\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}x}{\lambda}}.$$

Na hodnotu E není kladeno žádné omezení vyjma podmínky $E \geq 0$. Volná částice může nabývat libovolné energie. Viz též Bohrovo spektrum, jak se mění ve spojité, když se částice vzdaluje od jádra a osvobozuje se. Spojitý obor hodnot nabývá i hybnost $p = \sqrt{2mE}$.

Příklad 22 – potenciálová jáma 3

Je-li částici uzavřena v jednorozměrné jámě délky L, očekáváme, že vně jámy vymizí vlnění s pohybem částice spojené, a vlnová funkce ψ bude nulová pro $x \leq 0$ a $x \geq L$. Schrödingerova rovnice poskytne stejné řešení jako v příkladu 21, neboť pohyb částice uvnitř jámy je volný. Okrajové podmínky ovšem upraví konkrétní hodnoty konstant A a B.

Má-li být $\psi(x = 0) = 0$, je nutno, aby v (59) bylo $B = 0$.

Z podmínky $\psi(x = L) = 0$ vyjde $\dfrac{2\pi L}{\lambda} = n\cdot\pi$, kde n je přirozené číslo, takže veličina λ nemůže být libovolná:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}, \text{ viz rovnice (51a).}$$

Kvantována je tedy i hybnost

$$p_n = \frac{nh}{2L}, \text{ viz rovnice (51b)}$$

i možné hodnoty energie

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2}, \text{ viz (39), (51c)}$$

a známe i tvar funkce $\psi(x) = A \sin \dfrac{\pi n x}{\lambda}$.

Nezodpovězenou otázkou ovšem zůstává, co tato funkce ψ, potažmo celá funkce $\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} f t}$ znamená, co jsme to vlastně počítali.

V kvantové mechanice se veličina Ψ nazývá *vlnová funkce* a její interpretaci podal M. Born: zatímco v klasické mechanice je stav objektu dokonale popsán, známe-li v kterémkoliv čase jeho polohu $\boldsymbol{r}(t)$, a hybnost $\boldsymbol{p}(t)$, nabývá výchylka vlnění, tj. vlnová funkce, nenulové hodnoty obecně všude, v celém prostoru. Její klasický význam známe: druhá mocnina amplitudy kmitů v daném místě je úměrná intenzitě vlnění $(\mathrm{W} \cdot \mathrm{m}^{-2})$. Přijetím myšlenky fotonů lze říci, že světlo je tím intenzivnější, čím je v daném místě více fotonů, neboli čím je větší pravděpodobnost, že se tam foton objeví. Born tuto interpretaci rozšířil i na vlnění částicové: hodnota výrazu $|\Psi(x, y, z, t)|^2 \Delta V$ je přímo úměrná pravděpodobnosti výskytu částice v prostorovém intervalu velikosti ΔV myšleném okolo konkrétního bodu $[x, y, z]$. Když konstantu úměrnosti u vlnové funkce vypočítáme tak, aby

$$\int\limits_V |\psi|^2 \, \mathrm{d}V = 1, \tag{60}$$

tj. vlnovou funkci tzv. *normujeme,* má výraz $|\psi|^2$ přímo hodnotu *objemové hustoty pravděpodobnosti* výskytu částice. (Přitom je $\left|\mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} f t}\right| = 1$.)

Příklad 23 – hustota pravděpodobnosti

Nalezneme nyní, jak hustota pravděpodobnosti výskytu částice v potenciálové jámě závisí na poloze x.

Řešení

Vlnovou funkci $\psi(x)$ nejprve normujeme. Požadavek (60) zde znamená hledat A tak, aby platilo

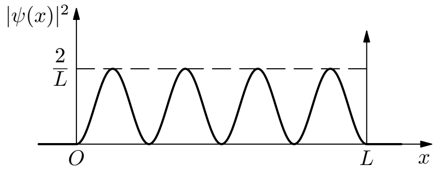
$$\int\limits_0^L A^2 \sin^2 \frac{\pi n x}{L} \, \mathrm{d}x = 1$$

Substitucí $y = \dfrac{\pi n x}{L}$ vyjde na levé straně

$$A^2 \cdot \frac{L}{n\pi} \int\limits_0^{n\pi} \sin^2 y \, \mathrm{d}y = A^2 \cdot \frac{L}{n\pi} \cdot n \cdot \frac{\pi}{2} = \frac{A^2 L}{2}, \quad \text{odkud} \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

Je tedy normovaná vlnová funkce n-tého stavu $\psi_n = \sqrt{\dfrac{2}{L}} \sin \dfrac{n\pi x}{L}$ a hustota pravděpodobnosti $|\psi_n|^2$ pro $n = 4$ je znázorněna na obr. 21.

Obr. 21 Hustota pravděpodobnosti výskytu částice v potenciálové jámě



Od počátku nevyslovená otázka „Kde tedy částice vlastně je?“ nyní nachází odpověď: Víme to sice úplně, dokonale, ale naše výpověď představuje vážnou změnu v nazírání na možnosti popisu světa – je pouze *pravděpodobnostní.* To platí samozřejmě i v makrosvětě, jenže tam je neurčitost našich odpovědí tak malá, že ji pod obyčejnou přesností měření ani neodkryjeme.

Až dosud byl pravděpodobnostní přístup vždy výrazem naší nedokonalé znalosti a například Einstein se tohoto argumentu nikdy nevzdal. Nyní však máme co činit s neurčitostí, jež je vložena do samé povahy zkoumaného jsoucna: dokud neprovedeme měření, tj. dokud je nepřimějeme interagovat s pozorovatelem (aparaturou), nebude se jeho stav vyznačovat určitou hodnotou.

Měření, až dosud tedy zjištění *míry*, bylo měřením fyzikální *veličiny*, jejího *množství* (*quantity* = *veličina*). V kvantové mechanice však veličiny ustupují *operátorům* a ty *působí* na vlnovou funkci. Například ve Schrödingerově rovnici (57) je místo veličiny „kinetická energie“ $\dfrac{p^2}{2m}$ zcela nový objekt – operátor $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\triangle$, či v jednorozměrné situaci $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x^2}$. V této analogii pak vyvodíme, že složce hybnosti p_x odpovídá operátor $-\dfrac{\mathrm{i}\hbar\,\partial}{\partial x}$, kde i je imaginární jednotka, $\mathrm{i}^2 = -1$.

Poznámka: Zacházení s komplexními veličinami je v kvantové mechanice běžné. Místo výrazu $|\psi|^2$ najdete velmi často vyjádření $\psi{\cdot}\overline{\psi}$, kde funkce $\overline{\psi}$ je komplexně sdružená k funkci ψ.

Vyvstává tedy praktická otázka: jak ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ nalézt hodnotu veličiny f, která nás zajímá? Zřejmě najdeme veličině f odpovídající operátor $\widehat{F}$, zřejmě tímto operátorem budeme působit na vlnovou funkci ψ, avšak tím vytvoříme novou funkci, změněnou (aktem měření jsme změnili stav). Co nyní s ní?

Návod nabízí sama výchozí Schrödingerova rovnice (58). Její levá strana představuje působení operátoru energie na hledanou vlnovou funkci, pravá strana dokonce obsahuje hodnotu energie E příslušející stavu ψ. Toto E snadno osamostatníme. Ježto $\int\limits_V \overline{\psi}E\psi\,\mathrm{d}V = E\int\limits_V \overline{\psi}\psi\,\mathrm{d}V$, získáme integrací rovnice (58) energii

$$E = \frac{\int\limits_V \overline{\psi}\widehat{H}\psi\,\mathrm{d}V}{\int\limits_V \overline{\psi}\psi\,\mathrm{d}V}.$$

Pokud je vlnová funkce normována dle (60), získáme elegantní vztah pro energii E ve stavu ψ: $E = \int\limits_V \overline{\psi}\widehat{H}\psi\,\mathrm{d}V$ a s ním i návod, jak obdobně dopočítat i hodnotu F veličiny f ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ:

$$F = \int\limits_V \overline{\psi}\widehat{F}\psi\,\mathrm{d}V. \tag{61}$$

I zde se uplatní pravděpodobnostní povaha výpovědí o kvantověmechanických systémech: hodnota F je hodnotou „jen" střední, v tom smyslu, že každý akt měření na velkém počtu stejných souborů dá hodnotu např. odlišnou od F, ovšem střední hodnota těchto výsledků se pak bude blížit k hodnotě vypočtené dle (61).

Pocitu neurčitosti, ať pramení z nejasností okolo určení polohy částice, ze ztráty smyslu, který dosud klasická fyzika udělovala např. pojmu *trajektorie*, z pouze pravděpodobnostního výkladu smyslu vlnové funkce či naposledy nyní z významu hodnoty F coby pouze „střední" hodnoty měřené veličiny, dal poprvé v roce 1926 ještě jiný význam W. Heisenberg ve svých tzv. *relacích neurčitosti (Unbestimmtheitrelation, UBR)*:

Existují dvojice veličin, např. poloha a hybnost, jež jsou vzájemně tzv. *nekompatibilní* a jež určit zároveň s libovolnou přesností *není v principu možné*, nýbrž zhruba platí

$$\Delta r \cdot \Delta p \geq h. \tag{62}$$

Přesněji pak: je-li např. Δx nepřesnost v určení souřadnice x polohového vektoru $\boldsymbol{r}$ předmětu, nelze odpovídající x-ovou souřadnici p_x jeho vektoru hybnosti $\boldsymbol{p}$ změřit lépe, než udává relace

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{62a}$$

Klasická fyzikální zkušenost nám ovšem neumožňuje princip neurčitosti zažít.

Příklad 24 – saze

Je-li saze či prachová částice dostatečně lehká (hmotnost drobných částeček se měří na tzv. nanovážkách, tedy $m \simeq 10^{-9}$ gramu), stává se součástí termodynamického souboru, jímž je ovzduší v daném prostoru. Platí pak pro její energii $E = \dfrac{p^2}{2m} = \dfrac{3}{2}kT$ a hybnost saze činí $p = \sqrt{3mkT}$, kde k je Boltzmannova konstanta, T teplota prostředí. Číselně

$$p^2 \simeq 10^{-12}\ \mathrm{kg} \cdot 10^{-23}\ \mathrm{J} \cdot \mathrm{K}^{-1} \cdot 10^2\ \mathrm{K}, \qquad p \simeq 10^{-16}\ \mathrm{kg} \cdot \mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}.$$

I kdybychom tuto hybnost dokázali změřit na 8 platných cifer, což je za hranicí našich možností, činila by neurčitost v odhadu hybnosti $\Delta p = \delta p \cdot p = 10^{-8} \cdot 10^{-16}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}} = 10^{-24}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}$, což je z našeho pohledu nesmírně málo, ale s ohledem na relace neurčitosti stále příliš! Dle (62) bychom určení polohy měli zatíženo chybou řádově $\Delta r \approx \dfrac{h}{\Delta p} = 10^{-10}$ m, a určit polohu saze s přesností na velikost atomu považujeme za vynikající.

Jiná situace ovšem nastane, když na atomární úroveň řádu 10^{-10} m zkoumáme objekty, jejichž hybnost je ještě menší než hybnost prachové částice.

Příklad 25 – rychlost elektronu v atomu

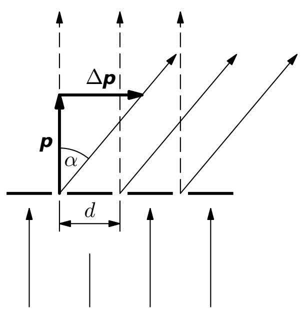
Bohrův výpočet rychlosti elektronu na n-té kvantové dráze dá dle (34c)

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\,\frac{1}{n}.$$

Neurčitost polohy elektronu je přitom rovna rozměru n-té dráhy, tedy dle (34a) $\Delta x_n = 2r_n = \dfrac{8\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}n^2$. Takto přesně lokalizovaná částice má ovšem dle (62a) neurčitost v hybnosti $\Delta p_n \geq \dfrac{\hbar}{2\Delta x_n}$, neboli $\Delta v_n \geq \dfrac{\hbar}{2m\Delta x_n}$. Relativní neurčitost pak činí $\delta v_n = \dfrac{\Delta v_n}{v_n}$, což po dosazení dá hodnotu $\dfrac{1}{4n}$. V souladu s Bohrovým principem korepondence se s rostoucím kvantovým číslem kvantová neurčitost vytrácí, neboť pro veliká n je atom již klasickým objektem, ale v základním stavu činí neurčitost $\delta v_1 = 25\ \%$.

Téměř klasickou ukázkou principu neurčitosti je ohyb světla na optické mřížce (obr. 22). Světelný svazek je před optickou mřížkou veden (téměř) přesně jedním směrem, čemuž odpovídá téměř nulová neurčitost hybnosti p fotonů světla. Zato je ovšem svazek delokalizovaný, je téměř všude, tj. o poloze fotonu nevíme nic.

Na štěrbině optické mřížky se stav soustavy zásadně promění: světlo je nyní lokalizováno s přesností rozměru mřížkové konstanty: $\Delta x = d$. To má bezprostřední vliv na hybnost fotonů.



Obr. 22 Ohyb světla na difrakční mřížce

Nejistota Δp se z nuly změní na $\Delta p = p \sin\alpha$, kde α je úhel ohybu svazku od svazku hlavního. Vyjádříme-li hybnost fotonu dle Einsteinova vztahu $p = \dfrac{h}{\lambda}$, zjistíme, že známý vztah pro ohyb světla na mřížce

$$d \sin \alpha = k \cdot \lambda$$

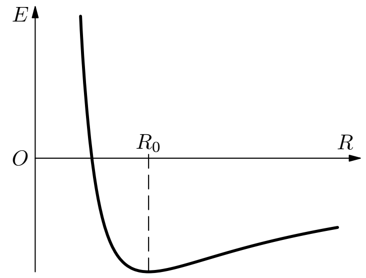
je jen jinou verzí relací neurčitosti (62): cenou za prostorovou lokalizaci je ztráta informace o směru šíření světla, obecně o hybnosti částice.

Princip neurčitosti lze využít i k odhadu velikosti některých veličin. Myšlenka jaderného elektronu byla právě zpochybňována i na základě odhadů založených na (62): s rozměrem jádra řádově (10^{-15} až 10^{-14}) m je takto velká neurčitost Δr v lokalizaci elektronu spojena s neurčitostí hybnosti Δp řádově $\frac{h}{\Delta x} = 10^{-20}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}$. Sama velikost hybnosti musí ovšem být řádově alepoň takto velká, odkud odhadovaná energie činí $\frac{p^2}{2m} \approx 10^{-40+30}$ J, tedy opět v řádu GeV, v souladu s výpočtem v příkladu 19. Takovými energiemi ovšem vazbové síly jádra nedisponují.

Příklad 26 – velikost klasického atomu

Při výpočtech poměrů v atomu si Thomsonův i Rutherfordův model vypůjčily experimentální data, totiž velikost ionizační práce W_{i}, aby vypočítaly velikost svého (vodíkového) atomu, viz (6), (15), kdežto první odhad teoretický nabídl až odhad rozměrový (31).

Nechť tedy atom má rozměr R. Z neurčitosti $\Delta r \simeq 2R$ vyjde neurčitost hybnosti $\Delta p \simeq \frac{h}{2R}$ a na kinetickou energii elektronu usuzujeme v řádu $T \simeq \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8mR^2}$. V elektrostatickém poli jádra má dále elektron potenciální energii $V = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{R}$, tedy celkově $E \simeq \frac{h^2}{8mR^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}$, viz obr. 23.



Obr. 23 Závislost energie elektronu na velikosti stomu

Hodnotu R určíme z podmínky minima energie: $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}R} = 0$, odkud

$$R_0 = \frac{\pi\varepsilon_0 h^2}{me^2} \simeq 5\text{Å},$$

což sice je hodně, ale řádový odhad je únosný.

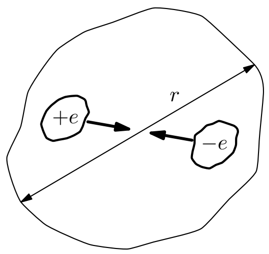
Rozlučme se s principem neurčitosti v podobě (62) úvahou, která zajímavě omezuje možnou velikost elementárního náboje.

Příklad 27 – elementární náboj

Kvantová teorie elektromagnetického pole vychází ze základního stavu pole bez náboje a elektrické náboje, jak je pozorujeme a registrujeme, považuje za excitace, vzbuzené stavy elektromagnetického pole. Ukážeme si, že elementární náboj, coby taková excitace, nemůže mít libovolně velkou hodnotu.

Nechť se tedy v prostoru velikosti r vytvoří elektrický náboj velikosti e. Jeho vznik je dle zákona zachování elektrického náboje provázen vznikem náboje $-e$ opačného znaménka (obr. 24).

Náboje nesmějí být příliš velké a nesmějí být lokalizovány příliš blízko sebe: Zrychlení $a \simeq \frac{F}{m}$ vzájemného pohybu k sobě, kde přitažlivá elektrostatická síla mezi náboji má řádovou velikost $F \simeq \frac{e^2}{\varepsilon_0 r^2}$ a m je hmotnost náboje, rozhoduje o době pohybu nábojového páru $t \simeq \sqrt{\frac{r}{a}}$. Pro tu platí relativistické omezení $\frac{r}{a} > \frac{r^2}{c^2}$, (světlo musí dráhu r urazit v kratším čase), neboli po dosazení a úpravě



Obr. 24 Vznik nábojové dvojice +e, −e

$$e^2 < \varepsilon_0 c^2 m r. \tag{63}$$

Bude-li prostor velmi malý, bude tato lokalizace nábojů provázena velkou neurčitostí v hybnosti řádu $\Delta p \simeq \frac{\hbar}{r}$, tedy i sama hybnost p bude alespoň takto velká, s energiemi řádu $\frac{p^2}{m} \simeq \frac{\hbar^2}{mr^2}$, tedy

$$\frac{1}{\varepsilon_0} \frac{e^2}{r} \simeq \frac{\hbar^2}{mr^2}, \tag{64}$$

neboť povaha této energie je svým původem elektrostatická. (Levá strana rovnice představuje řádovou hodnotu potenciální energie elektrostatické nábojového páru +e, −e ve vzdálenosti řádově r.) Po úpravě získá omezení (63) podobu

$$e < \sqrt{\hbar \varepsilon_0 c}. \tag{65}$$

Číselně $e < 5{,}3 \cdot 10^{-19}$ C, to je pěkná řádová shoda.

Jinou, stejně překvapující podobou relací neurčitosti je vztah

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx h \tag{66}$$

svazující do podobné závislosti jako (62) dobu Δt měření energie a neurčitost v jejím určení ΔE. Čím přesněji chceme energii změřit, tím déle musí měření trvat. Naše makroskopická zkušenost je opět řádově zcela nad těmito úvahami: i kdybychom měřili bleskovou rychlostí v čase řádově mikrosekundy, bude neurčitost energie ΔE činit 10^{-28} J, což nepostřehneme (molekula plynu v pokoji má za běžné teploty energii $E = \frac{3}{2}kT$ desetimilonkrát větší).

Probíhají-li však některé procesy femtosekundovou rychlostí ($1f = 10^{-15}$), pak v naší bilanci energie budou chybět či přebývat elektronvolty, a to už může být relevantní.

Jinými slovy nás relace (65) upozorňuje, že zákon zachování energie můžeme vyslovit, resp. ověřit jen s omezenou přesností, právě jako lze jen omezeně přesně ověřit zákon zachování hybnosti. Přesnost prvého je dána dobou měření, přesnost druhého lokalizací v prostoru.

Principy kvantové mechaniky a fundamentálnost jejich závěrů hájil neobyčejně důsledně, zejména v diskusích s Einsteinem, Niels Bohr. Byl jedním z nejvlivnějších fyziků své doby a jeho interpretace kvantové mechaniky, dodnes platná, dala svojí hloubkou a konzistencí vzniknout pojmu *kodaňská škola*.

Řešit kvantověmechanickou úlohu vodíkového atomu je pro nás nereálné. Úloha je trojrozměrná, a byť kulová symetrie atomu dovoluje problém zjednodušit, stále jde o dosti obtížný výpočet, jehož technická náročnost hrozí převážit nad fyzikálním zaměřením studijního textu. Na závěr proto pro představu jen shrneme hlavní výsledky výpočtu.

Trojrozměrná Schrödingerova rovnice řeší úlohu vodíkového atomu zatím nejdokonaleji, pomineme-li relativistické korekce, a především konzistentně s vlastními principy, kdežto předchozí řešení vždy jen, byť sebelépe, reflektovala pozorované danosti. Především z rovnice zcela přirozeně vyplyne existence tří kvantových čísel: *hlavního* n, jež nabývá hodnot přirozených čísel a rozhoduje o *energii* soustavy v souladu s Bohrovými závěry

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2}, \tag{34b}$$

vedlejšího l, takzvaného *orbitálního* vázaného podmínkou $l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$ a určující možné hodnoty momentu hybnosti dle vztahu

$$L = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar \tag{67a}$$

a *magnetického* m_l s možnými hodnotami $0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$, které kvantuje hodnoty průmětu momentu hybnosti L_z do zvoleného směru podle vztahu

$$L_z = m_l \cdot \hbar \tag{67b}$$

Kvantování, tj. fakt, že se při řešení Schrödingerovy rovnice objeví přirozená čísla, je hlouběji spjat s její stavbou – každá prostorová proměnná dá v rovnici vzniknout jednomu kvantovému číslu.

Když se kvantověmechanické předpovědi, podobně jako před ní i teorii Bohrově a Sommerfeldově nedařilo vysvětlit pozorované odchylky od naměřených spektroskopických dat, především existenci blízkých dvojčar, tedy rozštěpení čáry na dublet, přišli roku 1925 S. A. Goudsmith a G. E. Uhlenbeck s myšlenkou, že elektron má ještě vlastní, vnitřní a nezávislý moment hybnosti, tzv. *spin*. V analogii s orbitálními vztahy (67) určili velikost spinu

$$S = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar\,, \tag{68a}$$

kde spinové kvantové číslo činí $s = \dfrac{1}{2}$. Složka spinu do vnějšího magnetického pole je obdobně jako v (67b) dána vztahem

$$S_z = m_s \cdot \hbar\,, \tag{68b}$$

kde spinové magnetické kvantové číslo m_s obdobně nabývá celkem $2s + 1 = 2$ hodnoty, totiž $+\dfrac{1}{2}$ a $-\dfrac{1}{2}$. To umožnilo vysvětlit nejen existenci dubletů, ale i jiné jevy, jak je známe např. z chemie.

Zatímco klasická kvantová mechanika spin přijala, ale nevysvětlila, vyplynula o tři roky později jeho existence přirozeně z Diracovy kvantové mechaniky relativistické.

Shrňme na závěr řešení vodíkového atomu, jak je podává nerelativistické přiblížení:

1. Od kartézských souřadnic x, y, z přechází popis k sférickým souřadnicím: r je vzdálenost od počátku, ϑ je tzv. zenitový úhel (měří polohu rovnoběžky od zenitu dolů), φ je tzv. azimutový úhel (měří polohu poledníku od osy x v kladném smyslu).

Tab. 2 Normované vlnové funkce atomu vodíku

n	l	m_l	$\Phi(\varphi)$	$\Theta(\vartheta)$	$R(r)$
1	0	0	$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\dfrac{1}{\sqrt{2}}$	$\dfrac{2}{r_1^{3/2}} \exp(-r/r_1)$
2	0	0	$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\dfrac{1}{\sqrt{2}}$	$\dfrac{1}{2\sqrt{2}\,r_1^{3/2}} \left(2 - \dfrac{r}{r_1}\right) \exp(-r/2r_1)$
2	1	0	$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\dfrac{\sqrt{6}}{2} \cos\vartheta$	$\dfrac{1}{2\sqrt{6}\,r_1^{3/2}} \dfrac{r}{r_1} \exp(-r/2r_1)$
2	1	± 1	$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$	$\dfrac{\sqrt{3}}{2} \sin\vartheta$	$\dfrac{1}{2\sqrt{6}\,r_1^{3/2}} \dfrac{r}{r_1} \exp(-r/2r_1)$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

2. Kulová symetrie atomu dovoluje vlnovou funkci vyjádřit jako součin tří funkcí, každá jedné proměnné

$$\psi(x, y, z) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi) \tag{69}$$

a pro každou funkci řešit zvlášť jedinou rovnici.

3. Prvních pět vlnových funkcí (jedna vlnová funkce pro $n = 1$ a čtyři vlnové funkce pro $n = 2$) jsou separovaně uvedené v Tabulce 2. Zde $r_1 = \dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} =$ $= 0{,}529$ Å je Bohrův poloměr.

Pozámka: V kvantové chemii se vlnové funkce nazývají *orbitaly*.

Příklad 28 – orbital 1s

Prozkoumáme vlnovou funkci základního stavu atomu vodíku, tzv. orbital 1s. Především si všimněme, že azimutální funkce Φ je konstantní, na úhlu φ nezávisí, a také zenitová funkce Θ je nezávislá na úhlu ϑ, tj. orbital je kulově symetrický. To obecně platí pro každý orbital typu s, tedy pro vlnovou funkci s $l = 0$, tj. je-li moment hybnosti elektronu nulový.

Radiální funkce je úměrná pouze e^{-r/r_1} a hustota pravděpodobnosti

$$|\psi(1\mathrm{s})|^2 \sim R^2(1\mathrm{s}) = \mathrm{e}^{-2r/r_1}.$$

Pravděpodobnost, že elektron leží v tenké kulové slupce poloměru r a tloušťky dr, je tedy úměrná výrazu

$$P(r, \mathrm{d}r) \sim 4\pi r^2\,\mathrm{d}r \cdot \mathrm{e}^{-2r/r_1}.$$

Maximum funkce $r^2\exp(-ar)$ určíme z podmínky $\mathrm{d}P/\mathrm{d}r = 0$ – řešením je sféra $r = r_1$, tedy sféra opět o poloměru, kam Bohrův-Sommerfeldův model klade klasickou první kruhovou dráhu.

Na závěr spočtěme pravděpodobnost, že elektron ve stavu 1s nebude od jádra dál než v kouli o Bohrově poloměru. Celá vlnová funkce $\psi(1\mathrm{s})$ má tvar (viz tabulka)

$$\psi(1\mathrm{s}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\,\frac{1}{r_1^{3/2}}\,\mathrm{e}^{-r/r_1}$$

a naším úkolem je vyčíslit integrál

$$P(0-r_1) = \frac{1}{\pi r_1^3}\int\limits_V \mathrm{e}^{-2r/r_1}\,\mathrm{d}V = \frac{1}{\pi r_1^3}\int\limits_0^{r_1} \mathrm{e}^{-2r/r_1}\,4\pi r^2\mathrm{d}r = \frac{4}{r_1^3}\int\limits_0^{r_1} r^2\mathrm{e}^{-2r/r_1}\,\mathrm{d}r, \tag{70}$$

kde za element objemu dV jsme opět vzali tenkou kulovou slupku poloměru r a tloušťky dr. Použijeme metodu per partes:

$$\int_0^{r_1} r^2\mathrm{e}^{-2r/r_1}\,\mathrm{d}r = \left[-\frac{r^2 r_1}{2}\mathrm{e}^{-2r/r_1}\right]_0^{r_1} + r_1\int_0^{r_1} r\mathrm{e}^{-2r/r_1}\,\mathrm{d}r \tag{70a}$$

$$\int_0^{r_1} r\mathrm{e}^{-2r/r_1}\,\mathrm{d}r = \left[-\frac{r r_1}{2}\mathrm{e}^{-2r/r_1}\right]_0^{r_1} + \frac{r_1}{2}\int_0^{r_1} \mathrm{e}^{-2r/r_1}\,\mathrm{d}r \tag{70b}$$

$$\int_0^{r_1} \mathrm{e}^{-2r/r_1}\,\mathrm{d}r = \left[-\frac{r_1}{2}\mathrm{e}^{-2r/r_1}\right]_0^{r_1} \tag{70c}$$

Integrál v (70c) dá $\frac{r_1}{2}(1-\mathrm{e}^{-2})$,

integrál v (70b) je roven $\frac{-r_1^2}{2\mathrm{e}^2}+\frac{r_1^2}{4}(1-\mathrm{e}^{-2})$,

a konečně integrál v (70a) činí $-\frac{r_1^3}{2\mathrm{e}^2}-\frac{r_1^3}{2\mathrm{e}^2}+\frac{r_1^3(1-\mathrm{e}^{-2})}{4}=\frac{r_1^3(\mathrm{e}^2-5)}{4\mathrm{e}^2}$.

Shrnuto: $P(0-r_1)=\frac{4}{r_1^3}\cdot\frac{r_1^3(\mathrm{e}^2-5)}{4\mathrm{e}^2}=1-\frac{5}{\mathrm{e}^2}$.
Pravděpodobnost, že ve stavu 1s najdeme elektron uvnitř Bohrovy sféry činí asi 32 %, kdežto pravděpodobnost, že elektron bude dál, je zhruba dvakrát větší.

4 Závěr

Zde je tedy ta nádherná teorie, snad jedna z nejdokonalejších, nejpřesnějších a nejúchvatnějších, jakou kdy člověk objevil

J. R. Openheimer

Tento studijní text vznikl v létě roku 2012, v roce mezi stým výročím Rutherfordova (1911) a stým výročím Bohrova (1913) modelu atomu a je skromným poděkováním všem velkým duchům, jejichž jména jste uvnitř nalezli a kdo pomohli – jak tomu při setkání fyziky a aplikované matematiky bývá – k dnes možná samozřejmému, ale z většího odstupu nahlíženo spíše neuvěřitelnému triumfu fyziky 20. století: o jsoucnech tak nepatrných, že smyslově nebadatelných, jsme dnes schopni činit kvantitativní předpovědi s chybou jednotek procent.

Dále je text připomínkou myšlenkového odkazu staré filozofické tradice (ať řecké, indické či čínské) a jejího inspirujícího vlivu na fyzikální myšlení. Velmi abstraktní a bez empirického základu dokázala často formulovat „brilliant imaginative explanations of the physical structure of the world“, a to ve velké míře v souladu s poznatky moderní vědy (A. L. Bastham).

Za třetí text připomíná, že definitivní řešení otázky o uchování identity na různě velkých škálách je pro fyzické bytí problematické a že nová podoba starého napětí mezi Démokritem a Aristotelem či Boltzmannem a Ostwaldem možná čeká právě na vás, dnešní řešitele FO.

Konečně na archetypální úrovni je i varováním *Strážce prahu*, jak jej význam slova *atom* probouzí: s postupujícím prolamováním pečetí nedělitelného vzrůstá brizantnost uvolněných energií. Dnes již nemáme co činit s dynamitem nebo atomovou bombou; vnitřně musíme být připraveni zvládnout síly, které tvoří a udržují celý Vesmír.

Úlohy

1. Předpokládejte, že elektron v Thomsonově vodíkovém atomu nekmitá, ale obíhá kolem středu po kruhové dráze o poloměru r. Určete
a) frekvenci f kruhového pohybu,
b) moment hybnosti L,
c) proud I, který je takovým pohybem vytvářen,
d) velikost m magnetického momentu příslušné proudové smyčky,
e) velikost magnetické indukce magnetického pole uprostřed této proudové smyčky,

vždy v závislosti na poloměru r kruhové dráhy.

2. Odhadněte horní hranici rozměru jádra atomu zlata výpočtem nejtěsnějšího přiblížení helionu s energií, jakou měl při pokusech Geigera a Marsdena.

3. Určete rychlost oběhu elektronu v Rutherfordově modelu atomu vodíku. Posuďte, zda takový atom není již relativistický.

4. Určete frekvenci oběhu elektronu v Rutherfordově modelu atomu vodíku. Odpovídající vlnovou délku srovnejte s vlnovými délkami viditelných čar spektra atomu vodíku.

5. Spočtěte výkon, jímž by měl vyzařovat elektron atomu vodíku na počátku svého pádu na jádro.

6. V jaké vzdálenosti od jádra už bude nutno pojmout pád elektronu relativisticky?

7. Rozborem Balmerova-Rydbergova vztahu (22) dokažte, že
a) celá Lymanova série leží v UV části spektra,
b) série Paschenova, Brackettova i Pfundova náležejí do infračervené části spektra.

Jakou barvu mají čáry H_α až H_δ Balmerovy série? Viz Tabulka barevných vjemů vlnových délek viditelné části spektra.

8. Lidské oko je nejcitlivější na žlutozelenou barvu. Při jaké teplotě žhavého černého tělesa padne maximum spektrální intenzity vyzařování právě do této oblasti?

9. Vypočtěte výkon P elektrického proudu, který bude procházet drátem o průměru $d = 0{,}80$ mm a délky $l = 20$ cm, má-li se teplota drátu udržet na 3 100 K. Ztráty vedením tepla neuvažujte, teplota okolí $T_0 = 300$ K.

10. Odvoďte voltampérovou charakteristiku, tj. tvar závislosti proudu I procházejícího vodičem na napětí U mezi konci vodiče. Odpor vodiče považujte za teplotně závislý dle lineárního vztahu $R(T) = A \cdot T$, kde A je konstanta. Předpokládejte, že vodič je v tepelné rovnováze s okolím, tj. nechladne ani se nezahřívá.

11. Odhadněte dobu „dohasínání" žárovky po vypnutí elektrického proudu.

12. Stanovte světelnou účinnost žárovky, tj. podíl energie, která z celého spektra záření emitovaného žhavým drátem při teplotě $T = 3\,000$ K připadá na viditelný obor.

13. Dokažte, že v dlouhovlnné oblasti záření přejde vztah (25) ve výsledek, jaký (viz obr. 11) předvídali Rayleigh a Jeans.

14. Posuďte, zda je kvantování energie nutné při studiu
   a) Země obíhající kolem Slunce,
   b) rotujícího fotbalového míče,
   c) kapky vody v bubnu pračky,
   d) molekuly kyslíku uzavřené v pokoji.

15. Určete energii, relativistickou hmotnost a hybnost fotonu UV záření o vlnové délce $\lambda = 320$ nm a porovnejte s hybností volného elektronu v rozžhaveném vlákně žárovky ($T = 3\,000$ K).

16. Pro lidské oko přivyklé tmě byla pro vlnovou délku 510 nm naměřena prahová hodnota vnímání $3{,}5 \cdot 10^{-17}$ W (na povrchu rohovky). Kolika fotonům za sekundu tato hodnota odpovídá?

17. Dopadá-li na katodu fotočlánku světlo ze rtuťové výbojky o vlnové délce $\lambda_1 = 546{,}1$ nm, je k zastavení fotoelektrického proudu potřeba brzdného napětí $U_1 = 1{,}563$ V. Dopadá-li na katodu záření vlnové délky $\lambda_2 = 404{,}7$ nm, je k dosažení téhož účinku zapotřebí napětí $U_2 = 2{,}356$ V. Vypočtěte Planckovu konstantu. Dosazujte $c = 2{,}998 \cdot 10^8\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$, $e = 1{,}602 \cdot 10^{-19}$ C.

18. Spočtěte ionizační práci vodíkového atomu.

19. Srovnáním empirického vztahu pro vlnové délky čar vodíkového spektra s Bohrovými postuláty vyvoďte vztah pro hodnotu Rydbergovy konstanty.

20. Jak by se změnily hladiny energie vodíkového atomu, kdyby kvantová podmínka měla tvar $L = n \cdot h$?

21. Dokažte, že součin $p \cdot q$ zobecněné hybnosti a zobecněné souřadnice má rozměr hybnost $\times$ délka.

22. Dokažte, že oběžná doba elektronu na eliptické dráze v Sommerfeldově modelu nezávisí na azimutálním čísle n_1.

23. Odvoďte vztah pro relativní posuv $\delta\lambda$ vlnové délky spektrální čáry o vlnové délce λ při jejím rozštěpení normálním Zeemanovým jevem v magnetickém poli o indukci B.

24. V experimentu z roku 1927 použili Davisson a Germer niklový krystal, jehož mezirovinná vzdálenost $d = 0{,}91$ Å. Svazek elektronů urychlený napětím $U = 54$ V vykazoval interferenční maximum, jestliže svíral s rovinami krystalu úhel $\vartheta = 65°$. Ověřte platnost de Broglieovy hypotézy.

25. Určete vlnovou délku de Broglieovy vlny spojené s pohybem

a) jedoucího vozidla,

b) molekuly kyslíku v plicích,

c) elektronu urychleného napětím U.

26. Spočtěte pravděpodobnost, s níž se v modelu atomu vodíku nachází elektron v základním stavu ve vzdálenosti od jádra větší než 0,95 a menší než 1,05 Bohrova poloměru.

27. Určete minimální hodnotu relativní chyby měření hybnosti elektronu urychleného napětím 1,0 kV, pokud zároveň měříme i jeho polohu a to s přesností do 1 Å.

28. Určete vzdálenost od jádra, kde je pro orbital 2s hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu maximální. Výsledek porovnejte s Bohrovou-Sommerfeldovou předpovědí pro poloměr druhé dráhy.

Řešení úloh

1. a) Roli dostředivé síly potřebné pro kruhový pohyb elektronu $\mathrm{F_d} = 4\pi^2 mrf^2$ sehrává elektrostatická přitažlivá síla mezi elektronem a kladně nabitou atomovou hmotou uzavřenou ve slupce o poloměru r: $F_\mathrm{e} = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{e^2 r}{R^3}$, kde f je frekvence pohybu a R poloměr atomu. Srovnáním

$$f = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m R^3}} = 1{,}26 \cdot 10^{15}\ \mathrm{Hz}$$

je stejná frekvence, jakou jsme odvodili pro kmity elektronu. Nezávisí na poloměru dráhy, Thomsonův atom je tzv. izochronní oscilátor.

b) Velikost momentu hybnosti $L = r \cdot mv$ však již na vzdálenosti od jádra záviset bude:

$$L = r^2 \cdot m\omega = r^2\sqrt{\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3}}.$$

Pro elektron kroužící po povrchu atomové koule vychází

$$L = \sqrt{\frac{mRe^2}{4\pi\varepsilon_0}}, \quad \text{číselně} \quad L = 1{,}8 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{kg \cdot m^2 \cdot s^{-1}}.$$

Řádová hodnota L se brzy ukáže jako klíčová.

c) Za jednu periodu projde smyčkou náboj o velikosti e, tedy $I = \dfrac{e}{T} = ef$, číselně $I = 0{,}20\ \mathrm{mA}$.

d) Magnetický moment $m = I \cdot S$ proudové smyčky činí $m = \pi r^2 ef$. U smyčky obepínající atom je $r = R$, pak $m = 16 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{A \cdot m^2}$.

e) Magnetická indukce ve středu kruhové smyčky o poloměru r činí $B = \mu_0 \dfrac{I}{2r}$, tedy $B = \mu_0 \dfrac{ef}{2r}$. Pro elektron kroužící na povrchu atomu, $r = R$, dostaneme číselně $B = 0{,}80\ \mathrm{T}$, tedy velmi silné magnetické pole.

2. Přiblížení kladně nabitého helionu ke kladně nabitému jádru atomu zlata je provázeno přeměnou kinetické energie helionu v potenciální energii elektrostatickou soustavy helion-jádro atomu Au. Při nejtěsnějším přiblížení, v okamžiku zastavení helionu, platí rovnost

$$E_\mathrm{k} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e \cdot Ze}{r}, \quad \text{odkud} \quad r = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Ze^2}{E_\mathrm{k}} = 3{,}0 \cdot 10^{-14}\ \mathrm{m}.$$

Výsledek je v pěkné shodě s odhadem z Př. 7.

3. Z rovnosti $\dfrac{mv^2}{R} = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{e^2}{R^2}$ dostaneme pro rychlost $v = \sqrt{\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mR}}$, číselně $v = 2{,}2 \cdot 10^6\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$, tedy méně než 1 % c. Zdá se zatím, že vodíkový atom dosud nevyžaduje v dobrém přiblížení relativistický přístup. Ten je nutný pro těžší nuklidy s velkým protonovým číslem Z. Viz u Sommerfeldova modelu.

4. Užitím výsledků předchozí úlohy máme ihned $f = \dfrac{1}{2\pi}\sqrt{\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mR^3}}$,

číselně $f = 6{,}56 \cdot 10^{15}$ Hz, což dává $\lambda = \dfrac{c}{f} = 45{,}7$ nm. Model tedy nepředvídá základní kmitavý stav vodíkového atomu coby oscilátoru ve viditelné části spektra.

5. Vyjádříme-li dostředivé zrychlení jako funkci vzdálenosti r elektronu od jádra, vyjde pro výkon záření vztah

$$P = \frac{2}{3}\,\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^3}\,\frac{e^6}{c^3 m^2 r^4}.$$

což na počátku, při $r = 0{,}529$ Å dává po dosazení $P = 46$ nW. To je sice málo, ale uvědomme si, jak obrovské je to číslo na jeden jediný vodíkový atom, navíc na počátku děje, v němž r bude klesat. Pár miligramů vodíku by už poskytlo výkon řádu terrawatů!

6. V klasickém přiblížení, viz (13) platí při kruhovém pohybu $v^2 r = \text{konst.}$ Shodneme-li se např., že rychlost 30 % c je již relativistická (hmotnost částice už vzroste o 5 %), vychází z rovnosti $v_0^2 R = 0{,}09 c^2 r$ pro poměrnou vzdálenost

$$\frac{r}{R} \doteq \frac{11 v_0^2}{c^2}\,\frac{11 \cdot 4{,}8 \cdot 10^{12}}{9 \cdot 10^{16}} = 6 \cdot 10^{-4}.$$

Elektron tedy bude „na 99,94 %“ u jádra.

7. a) S rostoucím indexem k čáry v dané sérii se její vlnová délka zmenšuje. Bude-li tedy v UV oblasti první čára, tím spíše tam budou ležet i další. Výpočet dává pro Ly1 $\dfrac{1}{\lambda_{12}} = R\left(1 - \dfrac{1}{4}\right)$, tedy $\lambda_{12} = 121{,}5$ nm, což je UV čára. Hrana Lymanovy série leží na $\lambda_{1\infty} = \dfrac{1}{R} = 91{,}1$ nm.

b) Zde naopak postupujeme od výpočtu hran sérií. Nejmenší (tedy potenciálně viditelná) je vlnová délka hrany série Paschenovy: $\dfrac{1}{\lambda_{3\infty}} = R \cdot \dfrac{1}{9}$, odkud $\lambda_{3\infty} = 820$ nm, což je velmi temně červená až oku neviditelná čára z infračervené oblasti. Pak ovšem bude v IR oblasti ležet celá série Pa a tím spíše i série Br, Pf, které se odrážejí od hran $\lambda_{4\infty} = \dfrac{16}{R} = 1\,459$ nm, resp.

$\lambda_{5\infty} = \dfrac{25}{R} = 2\,279$ nm.

c) Čáry mají tyto barvy: H_α je červená, H_β je modrozelená, H_γ a H_δ jsou fialové.

8. Žlutozelená barva je vymezena oborem vlnových délek (555 až 565) nm. Volme střední hodnotu $\lambda_{\max} = 560$ nm s rozptylem hodnot $\delta\lambda = 1$ %. Z Wienova zákona získáme $T = \dfrac{b}{\lambda_{\max}} = 5\,175$ K. Přitom $\delta T = \delta\lambda_{\max}$, tedy šířka teplotního intervalu bude $\Delta T \doteq 50$ K.

9. Je-li povrch drátu S, bude sálat s výkonem $\sigma S T^4$ a od okolí obdobně přijímat teplo s výkonem $\sigma S T_0^4$. Vzhledem k číselným hodnotám lze teplo od okolí zanedbat. Je tedy požadovaný výkon $P = \sigma\pi d l T^4$, číselně

$$5{,}67 \cdot 10^{-8} \cdot \pi \cdot 8{,}0 \cdot 10^{-4} \cdot 0{,}20 \cdot 3\,100^4\ \mathrm{W} = 2{,}6\ \mathrm{kW}.$$

10. Tepelná rovnováha vodiče znamená, že Joulův příkon tepla uvnitř vodiče je roven výkonu jeho záření s povrchu, je tedy $U \cdot I = \sigma S T^4$, kde S je povrch vodiče a T jeho teplota. Podle Ohmova zákona přitom $I = \dfrac{U}{R} = \dfrac{U}{AT}$. Spojením obou rovnic získáme hledanou závislost, např. ve tvaru $I^5 = \dfrac{\sigma S}{A^4} U^3$, tzv. *třípětinový zákon*.

11. Za dobu dt vysálá žhavé wolframové vlákno svým povrchem S teplo $\mathrm{d}Q = \sigma S T^4\,\mathrm{d}t$. To se projeví ochlazením o dT, přičemž platí $\mathrm{d}Q = -cV\varrho\,\mathrm{d}T$, kde c je měrná tepelná kapacita wolframu, ϱ jeho hustota. Pro vlákno tvaru tenkého válce o poloměru r a délce l přitom platí $S = 2\pi r l$, $V = \pi r^2 l$. Rovnici upravíme na tvar

$$-\frac{\mathrm{d}T}{T^4} = \frac{2\sigma}{\varrho c r}\mathrm{d}t.$$

Integrací a úpravou dostaneme

$$\int_{T_1}^{T_2} -\frac{\mathrm{d}T}{T^4} = \frac{T_2^{-3}}{3} - \frac{T_1^{-3}}{3} = \int_0^t \frac{2\sigma}{\varrho c r}\mathrm{d}t = \frac{2\sigma}{\varrho c r}t, \qquad t = \frac{c\varrho r}{6\sigma}\left(\frac{1}{T_2^3} - \frac{1}{T_1^3}\right).$$

Při volbě $T_1 \doteq 3\,000$ K, $T_2 \doteq 900$ K je $T_1^3 \gg T_2^3$ a výsledek lze dále zjednodušit. Pro $\varrho = 19 \cdot 10^3\ \mathrm{kg \cdot m^{-3}}$, $c = 130\ \mathrm{J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}}$, $r = 2{,}0 \cdot 10^{-5}$ m, $\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}}$ vychází $t \doteq 0{,}2$ s, což odpovídá zkušenosti.

12. Intenzita vyzařování v celém oboru vlnových délek je určena Stefanovým-Boltzmannovým zákonem $M = \sigma T^4$. Do viditelného oboru pak spadá, jak plyne z definice spektrální hustoty vyzařování H_λ, část určená integrálem $\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} H_\lambda\,\mathrm{d}\lambda$, kde volíme běžně přijímané $\lambda_1 = 400$ nm, $\lambda_2 = 800$ nm.

Obtížné numerické integraci se lze vyhnout s uvážením toho, jak úzký je obor (λ_1, λ_2). Určíme tedy H_λ pro střední hodnotu $\overline{\lambda} = 600$ nm a vynásobíme ji šířkou intervalu:

$$M_{\text{vid}} = 2\pi hc^2 \frac{1}{\overline{\lambda}^5} \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{hc}{\overline{\lambda}kT}} - 1} (\lambda_2 - \lambda_1).$$

Světelná účinnost pak bude $\eta = \dfrac{M_{\text{vid}}}{M}$.

Číselně vycházi:

a) pro $T = 3\,000$ K je $M = 4{,}60\ \mathrm{MW \cdot m^{-2}}$,

b) $\dfrac{hc}{\overline{\lambda}kT} = \dfrac{6{,}63 \cdot 10^{-34} \cdot 3{,}00 \cdot 10^{8}}{6{,}00 \cdot 10^{-7} \cdot 1{,}38 \cdot 10^{-23} \cdot 3{,}00 \cdot 10^{3}} = 8{,}00$. Jedničku ve jmenovateli lze tedy zanedbat a $\mathrm{e}^{8{,}00} = 2{,}98 \cdot 10^{3}$.

c) $\dfrac{\lambda_2 - \lambda_1}{\overline{\lambda}^5} = \dfrac{0{,}4 \cdot 10^{-6}}{0{,}6^5 \cdot 10^{-30}}\ \mathrm{m^{-4}} = 5{,}14 \cdot 10^{24}\ \mathrm{m^{-4}}$,

d) $2\pi hc^2 = 3{,}75 \cdot 10^{-16}\ \mathrm{J \cdot m^2 \cdot s^{-1}}$,

$$\text{tedy } \eta = \frac{3{,}75 \cdot 10^{-16} \cdot 5{,}14 \cdot 10^{24}}{2{,}98 \cdot 10^{3} \cdot 4{,}6 \cdot 10^{6}} = 0{,}14.$$

Účinnost žárovky vychází 14 %, tj. velmi málo – většina vysálané energie leží v infračervené oblasti, žárovka hlavně hřeje. $\lambda_{\max} = \dfrac{b}{T}$ zde dává 970 nm. Skutečná účinnost klasických žárovek je ještě nižší.

Poznámka: Povšimněte si, že pro kratší vlnové délky exponenciála rychle roste a celý zlomek se zjednoduší na výraz $\exp\left(-\dfrac{hc}{\lambda kT}\right)$, což se zavedením Planckova-Einsteinova kvanta $\varepsilon = hf$ vede na výraz $\mathrm{e}^{-\frac{\varepsilon}{kT}}$. Ten se objevuje i v klasickém Maxwellově-Boltzmannově rozdělení rychlostí a řešitelé FO jej znají i z barometrické formule, viz [9].

13. Pro velká λ je výraz $\dfrac{hc}{\lambda kT} \ll 1$ a lze použít přiblížení $\mathrm{e}^x \approx 1 + x$ pro $|x| \ll 1$. Pak $\mathrm{e}^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \approx \dfrac{hc}{\lambda kT}$ a H_λ přejde na tvar $H_\lambda = \dfrac{2\pi ckT}{\lambda^4}$. Mocninný ráz funkce pěkně kopíruje změřená data v dlouhovlnné oblasti (pro malá λ však selhává dokonce kvalitativně). Povšimněte si, že vypadla Planckova konstanta – na okamžik jsme se ocitli ve starém světě – proto ta shoda klasického modelu se skutečností.

14. Kritériem pro uplatnění kvantových jevů je hodnota momentu hybnosti L, resp. točivosti b při rotaci, resp. součinu relevantní energie a relevantního času v soustavě, a to v porovnání s hodnotou Planckovy konstanty

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

a) Zde $L = r \cdot mv \simeq 10^{11} \cdot 10^{24} \cdot 10^{4}\ \mathrm{J \cdot s} = 10^{40}\ \mathrm{J \cdot s}$.

b) Zde $L \simeq 10^{-1} \cdot 10^{0} \cdot 10^{1}\ \mathrm{J \cdot s} = 10^{0}\ \mathrm{J \cdot s}$.

c) Zde $L \simeq 10^{-1} \cdot 10^{-6} \cdot 10^{1}\ \mathrm{J \cdot s} = 10^{-6}\ \mathrm{J \cdot s}$.

d) Zde $E \simeq mv^2$, $t \simeq d/v$, tedy $E \cdot t \simeq mvd \simeq 10^{-26}\ \mathrm{kg} \cdot 10^{2}\ \mathrm{m \cdot s^{-1}} \cdot 10^{0}\ \mathrm{m} = 10^{-24}\ \mathrm{J \cdot s}$.

Ani v jednom případě nejsme v situaci, která by vyžadovala zvláštní, neklasický přístup.

15. $E = \dfrac{hc}{\lambda} = 6{,}2 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{J} = 3{,}9\ \mathrm{eV}$, $\quad m = \dfrac{h}{\lambda c} = 6{,}9 \cdot 10^{-36}\ \mathrm{kg}$,

$p = \dfrac{h}{\lambda} = 2{,}1 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}$.

Hybnost volného elektronu v rozžhaveném vlákně žárovky ($T = 3\,000\ \mathrm{K}$) je

$$p = mv = m\sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{3mkT} = 3{,}4 \cdot 10^{-25}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}.$$

16. Energie jednoho fotonu $\varepsilon = \dfrac{hc}{\lambda}$, proto počet registrovaný na sítnici za jednu sekundu $N = \dfrac{P}{\varepsilon} = \dfrac{P\lambda}{hc}$, číselně pouhých $N = 90\ \mathrm{s^{-1}}$.

17. Použijeme-li pro každý pokus rovnici fotoelektrického jevu, získáme

$$\frac{hc}{\lambda_1} = W_\mathrm{v} + eU_1, \qquad \frac{hc}{\lambda_2} = W_\mathrm{v} + eU_2,$$

odkud úpravou $h = -\dfrac{e}{c}\lambda_1\lambda_2\dfrac{\Delta U}{\Delta\lambda}$.

Číselně $h = \dfrac{1{,}602}{2{,}997} \cdot 5{,}461 \cdot 4{,}047 \cdot \dfrac{0{,}793}{1{,}414} \cdot 10^{-27-7}\ \mathrm{J \cdot s} = 6{,}625 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s}$.

18. Při ionizaci přestupuje elektron ze základního stavu daného kvantovým číslem $n = 1$ do stavu s $n \to \infty$. Tomu odpovídá práce $W_\mathrm{i} = -E_1 = \dfrac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$.

Číselně $W_\mathrm{i} = \dfrac{9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 1{,}602^4 \cdot 10^{-76}}{8 \cdot 8{,}85^2 \cdot 10^{-24} \cdot 6{,}626^2 \cdot 10^{-68}}\ \mathrm{J} = 21{,}7 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{J} = 13{,}6\ \mathrm{eV}$.

Shoda s naměřenou hodnotou 13,6 eV je úplná.

19. Z Bohrova postulátu (Planckovy-Einsteinovy kvantové rovnice) $f = \dfrac{E_2 - E_1}{h}$

dostáváme

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right), \quad k = n+1, n+2, \ldots.$$

Odtud srovnáním s (22) $R = \dfrac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}$. Číselně

$$R = \frac{9{,}1 \cdot 10^{-19} \cdot 1{,}60^4 \cdot 10^{-76}}{8 \cdot 8{,}85^2 \cdot 10^{-24} \cdot 6{,}626^3 \cdot 10^{-102} \cdot 3{,}00 \cdot 10^8}\ \mathrm{m^{-1}} = 1{,}090 \cdot 10^{-7}\ \mathrm{m^{-1}}.$$

Shoda je výborná.

20. Energie elektronů na jednotlivých hladinách, a tedy i rozdíly mezi nimi, vyjdou $4\pi^2$krát menší. Přechodům elektronů mezi hladinami by opovídala záření o zhruba 40-krát větší vlnové délce. Všechny spektrální série včetně ultrafialové Lymanovy by se přemístily do infračervené oblasti, viditelné čáry H_α až H_δ by nebylo lze vysvětlit.

21. Z definice zobecněné hybnosti $p = \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}$ plyne

$$[p \cdot q] = \left[\frac{E}{q/t} \cdot q\right] = [E \cdot t] = \mathrm{J \cdot s} = (\mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}) \cdot \mathrm{m}.$$

22. Oběžná doba $T = \dfrac{\pi ab}{w}$. Pro délky poloos a, b jsme odvodili vztahy (42). Plošná rychlost $\boldsymbol{w} = \dfrac{1}{2}\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v}$ souvisí s momentem hybnosti vztahem $\boldsymbol{L} = 2m\boldsymbol{w}$, přičemž ten je kvantován podmínkou (41φ). Po dosazení vychází

$$T(n, n_1) = 4\pi^2 \frac{mr_1^2}{h} \cdot n^3,$$

kde r_1 je Bohrův poloměr $r_1 = 0{,}529$ Å. Oběžná doba tedy závisí jen na hlavním kvantovém čísle, tj. na délce hlavní poloosy.

23. Změně energie mezi hladinami $\Delta E = \mu_\mathrm{B} \cdot B$ odpovídá změna frekvence vysílaného či pohlcovaného záření $|\Delta f| = \dfrac{1}{h}\mu_\mathrm{B} \cdot B$. Ježto $f = \dfrac{c}{\lambda}$, je $\Delta f = -\dfrac{c}{\lambda^2}\Delta\lambda$, takže relativní posuv vlnové délky bude

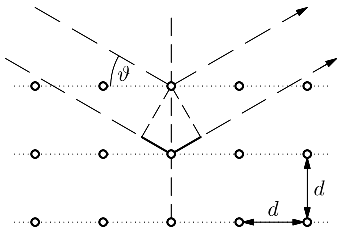
$$|\delta\lambda| = \frac{|\Delta\lambda|}{\lambda} = \frac{\Delta f}{c} \cdot \lambda = \frac{\lambda \mu_\mathrm{B}}{hc} \cdot B = \frac{1}{4\pi}\frac{e}{mc}\lambda \cdot B.$$

V silném magnetickém poli, např. $B = 0{,}10$ T, bude vodíková čára H_α Balmerovy série, $\lambda = 6\,562{,}8$ Å rozštěpena s posunem krajní složky o 0,02 Å. To se zdá být málo, ale např. již roku 1868 publikoval A. J. Ångström seznam asi tisíce (!) čar s přesností na 6 platných cifer.

24. Z Braggova vztahu pro polohy difrakčních maxim (obr. 25),

$$2d \cdot \sin\vartheta = k \cdot \lambda$$

pro $k = 1$ vychází $\lambda = 2 \cdot 0{,}91\ \text{Å} \cdot \sin 65° = 1{,}65\ \text{Å}$, což by při platnosti de Broglieova vztahu znamenalo hybnost elektronů
$p = \dfrac{h}{\lambda} = 4{,}02 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}$ a energii $E = \dfrac{p^2}{2m} = 88{,}6 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{J}$,
tedy 55,4 eV. Shoda je velmi pěkná.



Obr. 25 Difrakce záření na krystalu

25. V jednotlivých případech odhadujeme hybnost $p = mv$:

a) $p \simeq 10^3\ \mathrm{kg} \cdot 10^1\ \mathrm{m \cdot s^{-1}} = 10^4\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}$,

b) $$p = m\sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{3mkT} =$$
$$= \left(3 \cdot 32 \cdot 1{,}67 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{kg} \cdot 1{,}38 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{J \cdot K^{-1}} \cdot 310\ \mathrm{K}\right)^{\frac{1}{2}} =$$
$$= 2{,}6 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}.$$

c) V nerelativistickém přiblížení je $eU = \dfrac{p^2}{2m}$, tedy $p = \sqrt{2meU}$, takže např. pro $U = 5{,}0$ kV vychází
$$p = \left(2 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31}\ \mathrm{kg} \cdot 1{,}602 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{C} \cdot 5{,}0 \cdot 10^3\ \mathrm{V}\right)^{\frac{1}{2}} = 3{,}8 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}},$$
tedy řádově stejná hodnota jako v případě b).

De Broglieova vlnová délka $\lambda = \dfrac{h}{p}$ pak vychází a) $\lambda \simeq 10^{-38}$ m, tedy zatím nedetekovatelná, b,c) $\lambda \simeq 10^{-11}$ m, a to již jsou zlomky atomových vzdáleností, s nimiž musíme při zkoumání těchto objektů počítat.

26. Základní stav je určen vlnovou funkcí ψ_1 a hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu je rovna $|\psi_1|^2 = \dfrac{4}{r_1^3} r^2 \mathrm{e}^{-\frac{2r}{r_1}}$, což v místě $r = r_1$ dává $|\psi_1|^2(r_1) = \dfrac{4}{r_1 \mathrm{e}^2}$.
Hledanou pravděpodobnost lze místo integrace od $r = r_1 - 0{,}05 r_1$ do $r = r_1 + 0{,}05 r_1$ odhadnout s ohledem na nevelkou šířku oblasti prostým součinem

$$\Delta P = |\psi_1|^2(r_1) \cdot \Delta r = \frac{4}{r_1 \cdot \mathrm{e}^2} \cdot 0{,}1 r_1 = 5{,}4\ \%.$$

27. Klidová energie elektronu $E_0 = mc^2$ činí 0,511 MeV, tedy energie získaná v elektrickém poli $E = eU = 1$ keV nezmění jeho chování coby klasické částice, tj. $p_x = \sqrt{2meU}$. Z relace neurčitosti získáme $\Delta p_x = \dfrac{\hbar}{2\Delta x}$ takže

$$\delta p_x = \frac{\hbar}{2 \cdot \Delta x \sqrt{2meU}},$$

číselně $\Delta p_x = 5{,}27 \cdot 10^{-25}$ kg · m · s^{-1}, $p_x = 171 \cdot 10^{-25}$ kg · m · s^{-1}, tedy $\delta p = 3{,}1$ %.

28. Kulová symetrie orbitalu 2s dovoluje omezit se na radiální část $R(r)$ vlnové funkce $\psi(2\mathrm{s})$. Ježto pravděpodobnost výskytu elektronu v tenké kulové slupce poloměru r a tloušťky dr činí

$$\mathrm{d}P(r, \mathrm{d}r) = |\psi(2\mathrm{s})|^2 \mathrm{d}V = |\psi(2\mathrm{s})|^2 \cdot 4\pi r^2 \, \mathrm{d}r,$$

stačí studovat funkci (viz Tab. 2) $f = r^2 \left(2 - \dfrac{r}{r_1}\right)^2 \mathrm{e}^{-\frac{r}{r_1}}$.

Zaveďme bezrozměrný parametr $\varrho \equiv \dfrac{r}{r_1}$ a hledejme maximum funkce

$$g(\varrho) = (4\varrho^2 - 4\varrho^3 + \varrho^4)\mathrm{e}^{-\varrho}.$$

Požadavek na stacionární bod ϱ_0: $\dfrac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}\varrho} = 0$ vede na rovnici

$$\varrho^3 - 8\varrho^2 + 16\varrho - 8 = 0.$$

Zkusmo najdeme kořen $\varrho_0 = 2$ a dopočteme další kořeny $\varrho_{1,2} = 3 \pm \sqrt{5}$.

Druhá derivace dává funkci

$$\frac{\mathrm{d}^2 g}{\mathrm{d}\varrho^2} = (8 - 40\varrho + 40\varrho^2 - 12\varrho^3 + \varrho^4)\mathrm{e}^{-\varrho}$$

a dosazení kořenů $\varrho_0 = 2{,}000$, $\varrho_1 = 5{,}236$, $\varrho_2 = 0{,}764$ potvrdí minimum v bodě ϱ_0 a maxima v obou zbylých kořenech. Kvantověmechanický výpočet tedy pro orbital 2s říká toto:

1. nachází uzel ve vzdálenosti $2r_1$ – tam elektron nebude,
2. největší pravděpodobnost klade do vzdálenosti $r_2 = 5{,}24 r_1$, druhé, slabší maximum je blíž k jádru, ve vzdálenosti asi 0,40 Å.
3. Klasická předpověď se tedy nepotvrdila, ale potvrdí se, jak snadno vidět z tvaru $R(2\mathrm{p})$, pro orbitaly 2p. Pro ně $R^2(2\mathrm{p}) \sim r^2 \mathrm{e}^{\frac{r}{r_1}}$, tedy pravděpodobnost d$P = 4\pi r^2 R^2(2\mathrm{p}) \, \mathrm{d}r$ bude úměrná $\varrho^2 \cdot \mathrm{e}^{-\varrho}$ a podmínka pro stacionární bod dá hned řešení $\varrho = 4$, přičemž $\dfrac{\mathrm{d}^2 P}{\mathrm{d}r^2}$ vyjde záporné. Maximum bude jediné, ve vzdálenosti $r_2 = 4r_1$ od jádra.

Literatura

[1] Svoboda, K.: *Řečtí atomisté (překlady).* Nakladatelství Svoboda, Praha 1980.

[2] Lacina, A.: *Atom – od hypotézy k jistotě.* Školská fyzika IV, č. 4 (1996/97).

[3] Beiser, A.: *Úvod do moderní fyziky.* Academia, Praha, 1975.

[4] Moore, Walter J.: *Fyzikální chemie.* SNTL, Praha 1981.

[5] Syrový, A.: *Sbírka příkladů z fyziky.* SNTL, Praha 1971.

[6] Drška, L., Klimeš, B., Slavík, J. B.: *Základy atomové fysiky.* Nakladatelství ČSAV, Praha 1958.

[7] Jírů, J.: *Hybnost a energie při vzájemném působení těles.* Knihovnička FO č. 54, MAFY Hradec Králové 2012.

[8] Vybíral, B.: *Zpracování dat fyzikálních měření.* Knihovnička FO č. 52, MAFY Hradec Králové 2002.

[9] Vybíral, B.: *Mechanika ideálních plynů.* Knihovnička FO č. 67, MAFY Hradec Králové 2004.

[10] Jarešová, M., Volf, I.: *Integrální počet ve fyzice.* Knihovnička FO č. 73, MAFY Hradec Králové 2006.

Tabulka barevných vjemů vlnových délek viditelné části spektra

Obor vlnových délek [nm]	Barevný vjem
380 – 440	fialový
440 – 460	fialově modrý
460 – 475	modrý
475 – 480	nazelenale modrý
480 – 485	modrozelený
485 – 495	namodrale zelený
495 – 535	zelený
535 – 555	nažloutle zelený
555 – 565	žlutozelený
565 – 575	nazelenale žlutý
575 – 580	žlutý
580 – 585	oranžově žlutý
585 – 595	oranžový
595 – 620	oranžově červený
620 – 770	červený