

Úvod do moderní fyziky

Kvantová mechanika

Důvod vzniku:

Kolem roku 1900 nebylo možné některé problémy ve fyzice vysvětlit v rámci klasické fyziky:

- záření černého tělesa, fotoelektrický jev, čárové spektrum atomu

Záření černého tělesa

- elmg. záření emitované černým tělesem (pohlty veškeré dopadající záření a žádné neodrazí)

Wienův posunovací zákon:

Vlnová délka λ_{\max} , která odpovídá záření s největší intenzitou je nepřímo úměrná termodynamické teplotě černého tělesa:

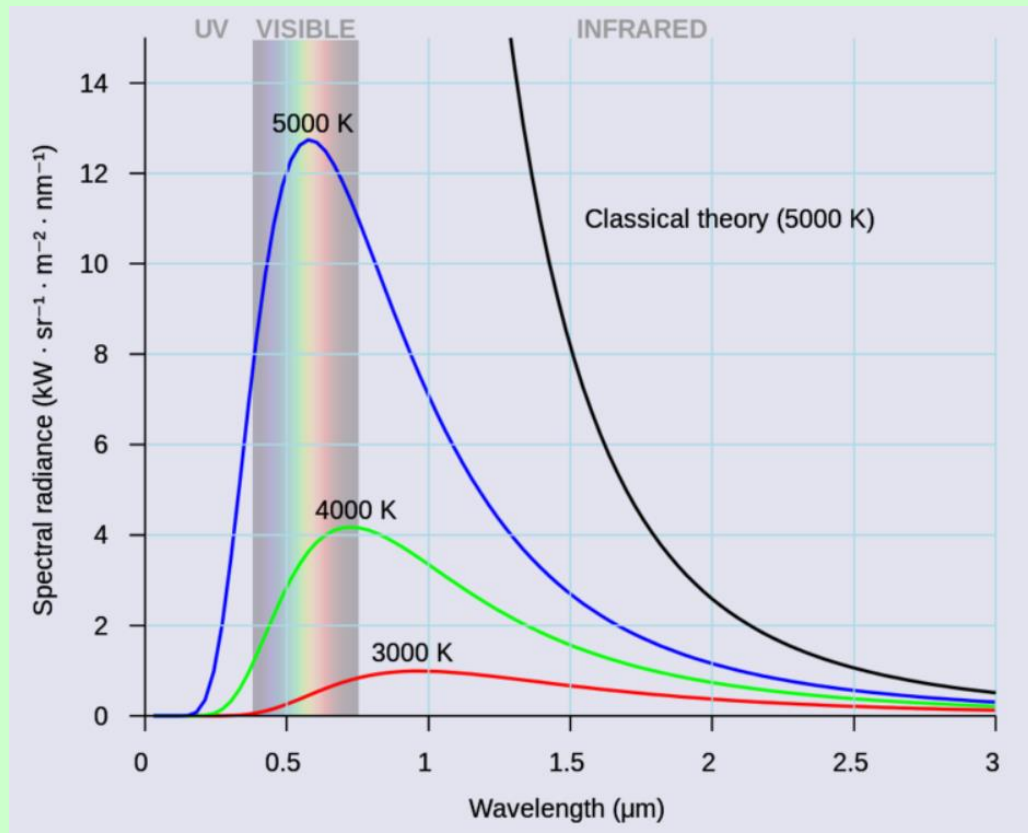
$\lambda_{\max} = b / T$, kde Wienova konstanta $b = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ m.K}$

Kvantová mechanika

Stefanův-Boltzmannův zákon:

intenzita vyzařování černého tělesa M_e je přímo úměrná čtvrté mocnině termodynamické teploty T černého tělesa:

$M_e = \sigma \cdot T^4$, kde Stefanova-Boltzmannova konstanta $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$



Kvantová mechanika

Planckova teorie:

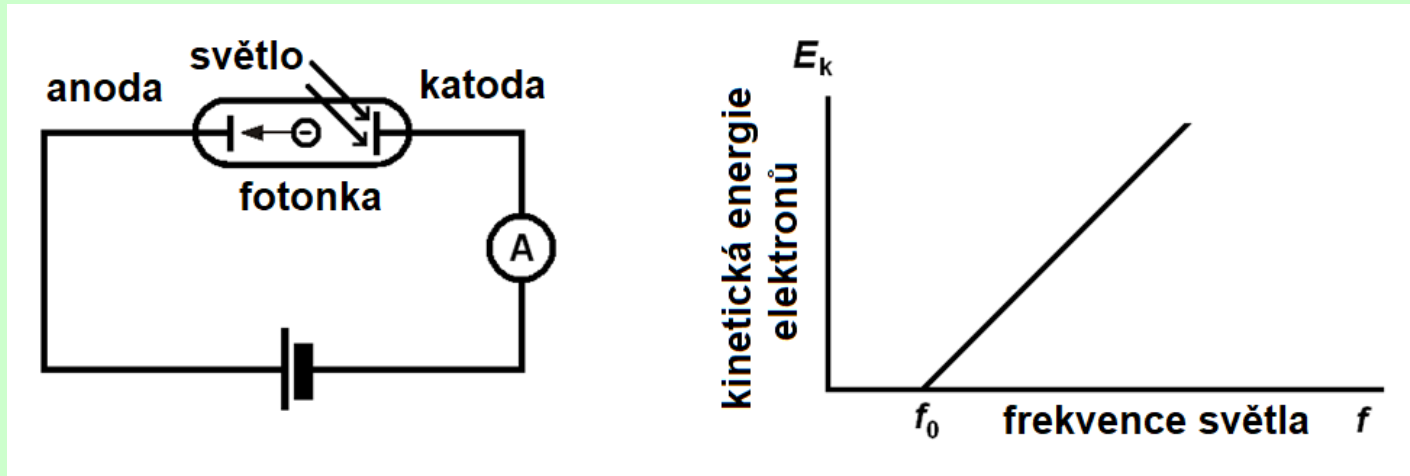
- energie světla (čili elektromagnetických vln) se nešíří spojitě, ale v energetických kvantech – fotonech
- kvantum vyzážené resp. pohlcené energie je přímo úměrné frekvenci záření: $E = h f$, kde $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J.s je Planckova konstanta
- analogicky elektrony vázané v atomu či v pevné látce nemohou nabývat libovolných energií ale jen určitých
- jsou na určitých energetických hladinách a k přechodu na jinou energetickou hladinu musí přijmout či odevzdat energii odpovídající rozdílu energií mezi hladinami podle toho, zda přechází na vyšší či nižší energetickou hladinu

Kvantová mechanika

Vnější fotoelektrický jev

- u pevných látek (kovů), na které dopadá elektromagnetické záření, dochází k uvolňování elektronů z jejich struktury – nastává tzv. fotoemise elektronů
- na konci 19. století nebylo jasné, proč jsou elektrony z látky uvolňovány pouze v případě vyšších frekvencí záření a proč záření nižších frekvencí elektrony z těles neuvolňuje ani při vysoké intenzitě
- klasická fyzika předpokládala, že vyšší intenzita dopadajícího záření by měla více rozkmitat elektrony uvnitř kovu a ty by měly být schopné snadněji opustit jeho strukturu

Kvantová mechanika



- experimentálně bylo studiem fotoelektrického jevu zjištěno:

1. Pro každý kov existuje určitá mezní frekvence f_0 . Pokud je frekvence f dopadajícího záření menší než mezní frekvence f_0 , záření není schopné uvolnit elektrony z kovu. Záření s frekvencí $f \geq f_0$ elektrony z kovu uvolňuje.
2. Pro $f \geq f_0$ je počet uvolněných elektronů přímo úměrný intenzitě dopadajícího záření.
3. Energie uvolněných elektronů je přímo úměrná frekvenci dopadajícího záření a nezávisí na intenzitě dopadajícího záření.

Kvantová mechanika

Einsteinova teorie fotoelektrického jevu - 1905 - důkaz kvantové povahy elektromagnetického záření - Nobelova cena za fyziku 1921:

- každý uvolněný elektron pohltí jedno kvantum energie $E = h f$

- platí $h f = W + \frac{1}{2} m_e v^2$, kde W je výstupní práce potřebná k uvolnění elektronu z kovu a $\frac{1}{2} m_e v^2$ je kinetická energie uvolněného elektronu

- fotoelektrický jev nastane, pokud je kvantum energie záření pohlcené elektronem aspoň rovno výstupní práci $W = h f_0$, kde f_0 je mezní frekvence daného kovu, při níž nastává fotoelektrický jev

Kvantová mechanika

Foton

- kvantová podstata elektromagnetického záření se projevuje nejenom při vyzařování a pohlcování záření ale rovněž také při jeho šíření prostorem
- tj. elektromagnetické záření se šíří v podobě jednotlivých kvant elektromagnetického vlnění – tzv. fotonů
- foton se chová jako částice, která má nulovou klidovou hmotnost m_0 a pohybuje se rychlostí c (rychlost světla ve vakuu)
- energie fotonu: $E = h f = h c / \lambda$, kde λ je vlnová délka příslušného elektromagnetického záření ve vakuu
- pohybová hmotnost fotonu m ze vztahů $E = mc^2$ a $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$
- hybnost fotonu: $p = m c = h / \lambda$

Kvantová mechanika

- světelné kvantum – foton se chová jako částice a současně je charakterizováno vlnovou délkou a podléhá všem zákonitostem vlnění - projev korpuskulárně vlnového dualizmu elektromagnetického záření
- elektromagnetické záření má dvojí povahu – současně se projevuje jako vlnění (interference, ohyb, lom, polarizace) i jako proud fotonů (vyzařování a pohlcování energie)

Vlnové vlastnosti částic

- vlnění lze popsat pomocí veličin charakteristických pro částice (hmotnost, energie, hybnost)
- podle Louise de Broglie ale lze také při popisu pohybu částic použít veličiny charakteristické pro vlnění

Kvantová mechanika

- De Broglieův vztah: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$
- s každou částicí o velikosti hybnosti p je zároveň spjato vlnění (tzv. de Broglieovy vlny) o vlnové délce λ

Vlnová funkce

- v kvantové mechanice nelze přesně určit trajektorii, po které se částice pohybuje
- lze určit pouze pravděpodobnost, s jakou se částice v čase t nachází v okolí bodu o souřadnicích x, y, z
- tato pravděpodobnost je určena vlnovou funkcí $\Psi(x, y, z, t)$, která vyjadřuje závislost amplitudy de Broglieovy vlny na prostorových souřadnicích a na čase

Kvantová mechanika

- $|\Psi(x, y, z, t)|^2$ - hustota pravděpodobnosti výskytu částice v čase t v okolí bodu o souřadnicích x, y, z
- čím vyšší hustota pravděpodobnosti, tím vyšší také pravděpodobnost výskytu částice v daném čase a místě
- hodnoty vlnové funkce $\Psi(x, y, z, t)$ lze určit z pohybové rovnice pro vlnění – tzv. Schrödingerovy rovnice – stěžejní matematická formulace kvantové mechaniky

Kvantová mechanika

Bohrův model atomu

- vznikl v důsledku problému ve spektrální analýze nevysvětlitelného klasickou fyzikou
- spektrální analýza zjišťuje vlnové délky záření vysílaného určitým zdrojem
- odtud lze získat informace o chemickém složení a teplotě zdroje
- spektra vznikají např. při vyzařování neboli emisi zahřátých těles – tzv. emisní spektra
- rozžhavená pevná nebo kapalná tělesa vysílají spojité spektrum, tj. souvislý barevný pás, v němž spojitě přechází jeden barevný pás v pás následující barvy
- u nízkoteplotního plazmatu (např. u ionizovaných plynů) však pozorujeme čárové spektrum, což je důkaz vyzařování světla určitých přesně definovaných vlnových délek

Kvantová mechanika

- čárové spektrum nelze vysvětlit pomocí klasické fyziky
- Rutherford objevil atomové jádro \Rightarrow vznik planetárního modelu atomu
- těžké jádro mělo podobné postavení jako Slunce a lehké elektrony postavení jako planety

[Viz experiment](#)

2 základní nedostatky planetárního modelu atomu:

1. Elektrony by ztrácely vyzařováním energii a za zlomek sekundy by dopadly do jádra – atom by nebyl stabilní
2. Spektrum záření vysílaného atomem by nebylo čárové ale spojitě

Řešení problému čárového spektra:

Niels Bohr r. 1913 vypracoval první kvantový model atomu vodíku

Kvantová mechanika

3 Bohrovy postuláty:

I. Ze všech možných kruhových pohybů elektronu kolem jádra, jež připouští klasická mechanika, jsou stabilní jen ty, jejichž poloměry r vyhovují podmínce

$2 \pi m r v = n h$, kde n je přirozené číslo.

II. Při pohybu po dráze, která vyhovuje prvnímu postulátu, neztrácí elektron žádnou energii.

- tento předpoklad je v rozporu s klasickou elektrodynamikou, podle níž by měl elektron pohybující se po zakřivené dráze vyzařovat energii
- tím by se energie elektronu neustále zmenšovala, až by dopadl na jádro
- děje uvnitř atomů se však řídí podle jiných zákonitostí než děje makrofyzikální, které řeší klasická fyzika

Kvantová mechanika

III. Při přechodu elektronu z dráhy o vyšším kvantovém čísle n_2 do dráhy s nižším kvantovým číslem n_1 vyzáří atom foton o frekvenci f , pro kterou

$$\text{platí: } f = \frac{E_{n_2}}{h} - \frac{E_{n_1}}{h},$$

kde E_{n_1} resp. E_{n_2} jsou energie příslušející elektronu na n_1 -té resp. n_2 -té dráze.

- pro atom vodíku je $f = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$, kde ε_0 je permitivita vakua

- kvantování poloměru elektronových drah \Rightarrow energie atomu kvantována

- pohlcuje-li, nebo vyzařuje-li obal atomu energii, nemění se jeho energie spojitě nýbrž po kvantech

Kvantová mechanika

- energie fotonu $E = h f$ elektromagnetického záření, který atom vodíku vyzáří resp. pohltí při přechodu elektronu z dráhy n_2 na dráhu n_1 resp. z dráhy n_1 na dráhu n_2 , je rovna rozdílu energií elektronu na těchto drahách

- platí tedy:
$$E = hf = E_{n_2} - E_{n_1} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

- pokud přechází elektron z dráhy s vyšší energií (a větším poloměrem) na dráhu s nižší energií (a menším poloměrem) atom energii vyzařuje

- pokud přechází elektron z dráhy s nižší energií (a menším poloměrem) na dráhu s vyšší energií (a větším poloměrem) atom energii pohlcuje

Kvantová mechanika

Jak vznikl vztah pro energii elektronu na n -té hladině $E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$?

- na elektron působí elektrostatická síla popsaná Coulombovým zákonem, která funguje jako síla dostředivá – elektron se pohybuje po kružnici:

$$F_e = F_d \Leftrightarrow \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \text{ (a), dále z 1. Bohrova postulátu } 2\pi m r v = n h$$

vyjádříme rychlost a dosadíme do rovnice (a)

- odtud vyjádříme poloměr kruhové dráhy (tzv. Bohrov poloměr):

$$r_n = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2} \text{ (b), pro elektron vodíku v zákl. stavu } (n = 1) \text{ je } r_1 = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

Kvantová mechanika

- kinetická energie elektronu s využitím rovnice (a): $E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$

- potenciální energie atomu vodíku odpovídá práci, kterou vykoná elektrická síla při přemístění elektronu z nekonečna do vzdálenosti r od

protonu: $E_p = \int_{\infty}^r F_e \cdot dr = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\infty}^r \frac{1}{r^2} \cdot dr = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

- celková energie elektronu: $E = E_k + E_p = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$ (c)

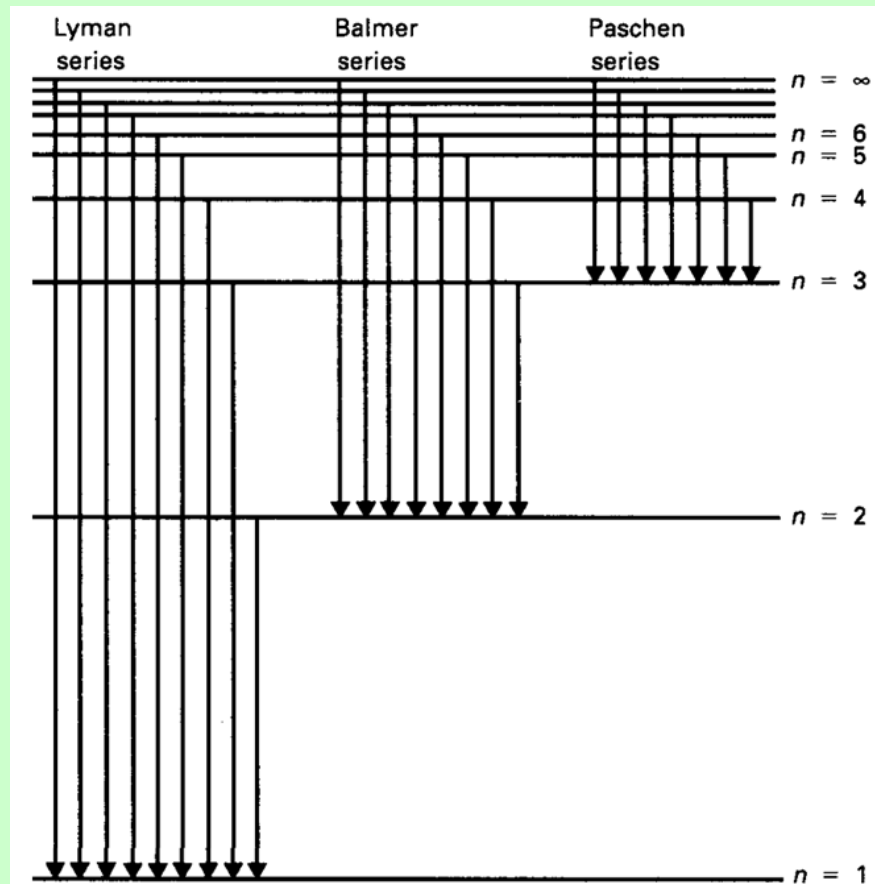
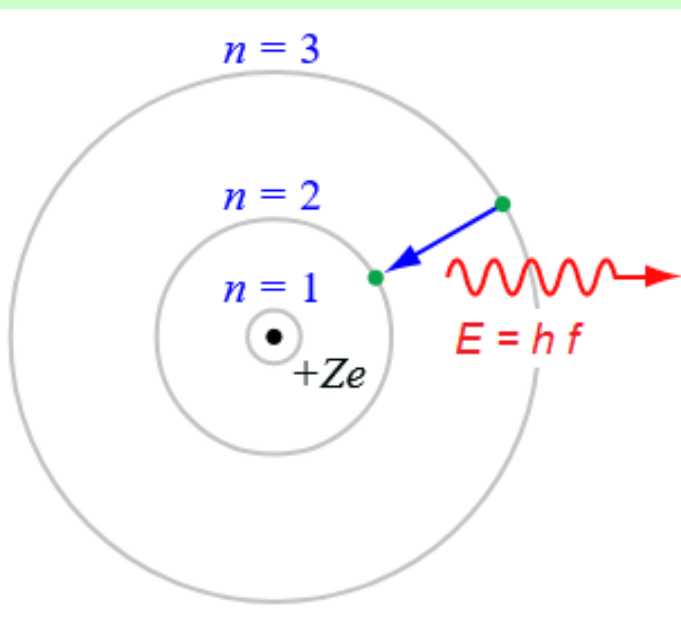
- do (c) dosadíme z (b) a dostáváme $E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$

- pro elektron vodíku v zákl. stavu ($n = 1$) je $E_1 = -2,17 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -13,6 \text{ eV}$ –
tzv. ionizační energie pro uvolnění elektronu vodíku ze zákl. stavu

Odvodit

Kvantová mechanika

- každá energetická hladina je charakterizována kvantovým číslem n
- nejnižší hladina má $n = 1$, další $n = 2$ atd.
- energie hladiny, která má $n = \infty$, je 0
- spektrum každého atomu má několik charakteristických sérií čar
- spektrum vodíku má tři hlavní série čar (Lyman, Balmer, Paschen)



Kvantová mechanika

Zpřesnění Bohrovy teorie, kvantová čísla

- podrobnější a přesnější studium čárových spekter plynů ukázalo:
- jednotlivé čáry nejsou jednoduché, ale že každá z nich je složena z více čar – tzv. jemná struktura spektrálních čar

- Bohrovy myšlenky bylo nutno upřesnit:
- ze závěrů kvantové teorie vyplývá, že v obalu atomu je kvantována nejen energie elektronu, ale také jeho moment hybnosti, magnetický moment příslušného pohybu kolem jádra a také spin

- k úplnému popisu pohybového stavu elektronu v obalu atomu je tedy třeba čtyř kvantových čísel:
 - n – hlavní kvant. číslo, určuje kvantování energie,
 - l – vedlejší (orbitální) kvant. číslo, určuje kvantování momentu hybnosti,
 - m – magnetické kvant. číslo, určuje kvantování magnet. momentu
 - s – spinové kvant. číslo, určuje kvantování vlastního momentu hybnosti elektronu – spinu