

# FYZIKA DĚJŮ A PROCESŮ

## 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  $\lambda_{\max}$ , která odpovídá záření s největší intenzitou je nepřímo úměrná termodynamické teplotě černého tělesa:**

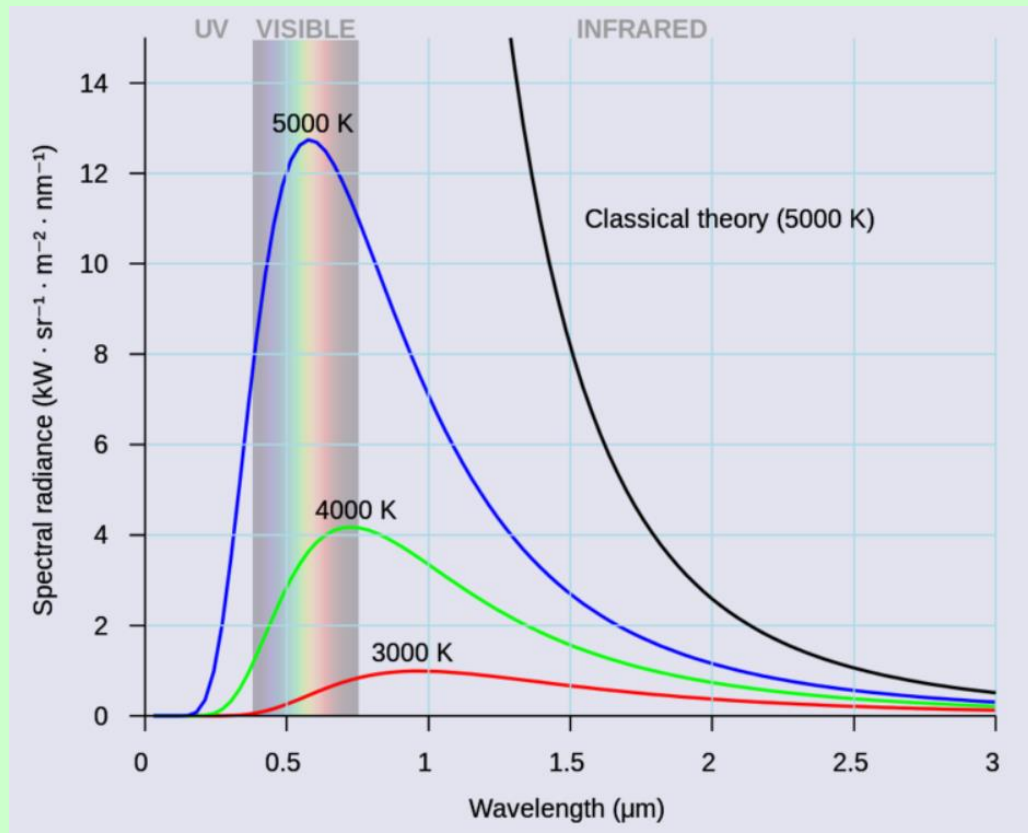
$$\lambda_{\max} = b / T, \text{ kde Wienova konstanta } b = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ m.K}$$

# 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:

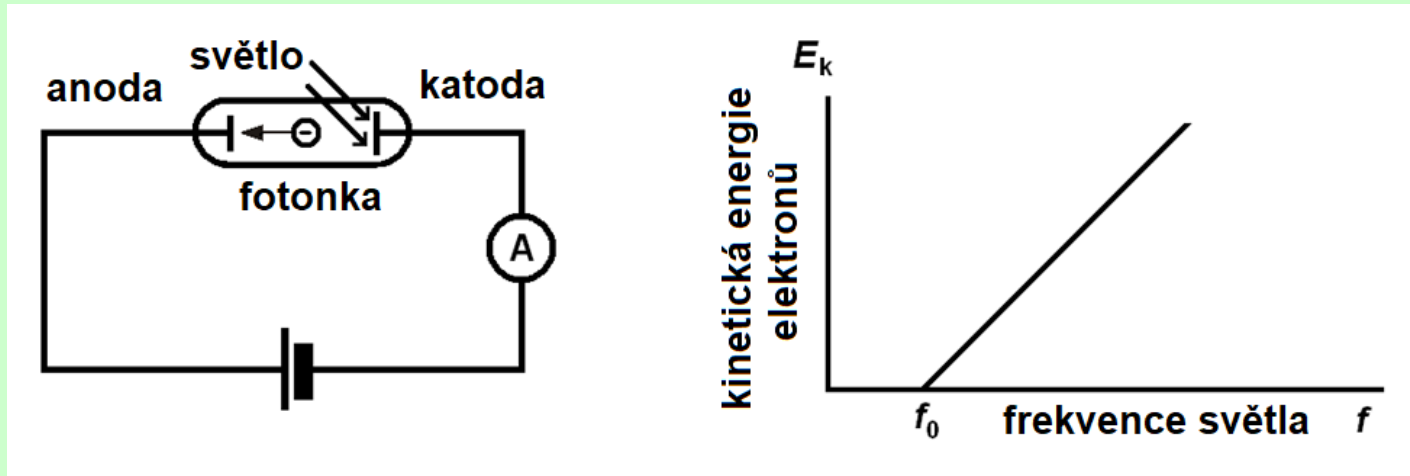
- energie světla (čili elektromagnetických vln) se nešíří spojitě, ale v energetických kvantech – fotonech
- kvantum vyzážené resp. pohlcené energie je přímo úměrné frekvenci záření:  $E = h f$ , kde  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  J.s je Planckova konstanta
- analogicky elektrony vázané v atomu či v pevné 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  $\lambda$  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  $\lambda$

## 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  $\varepsilon_0$  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)

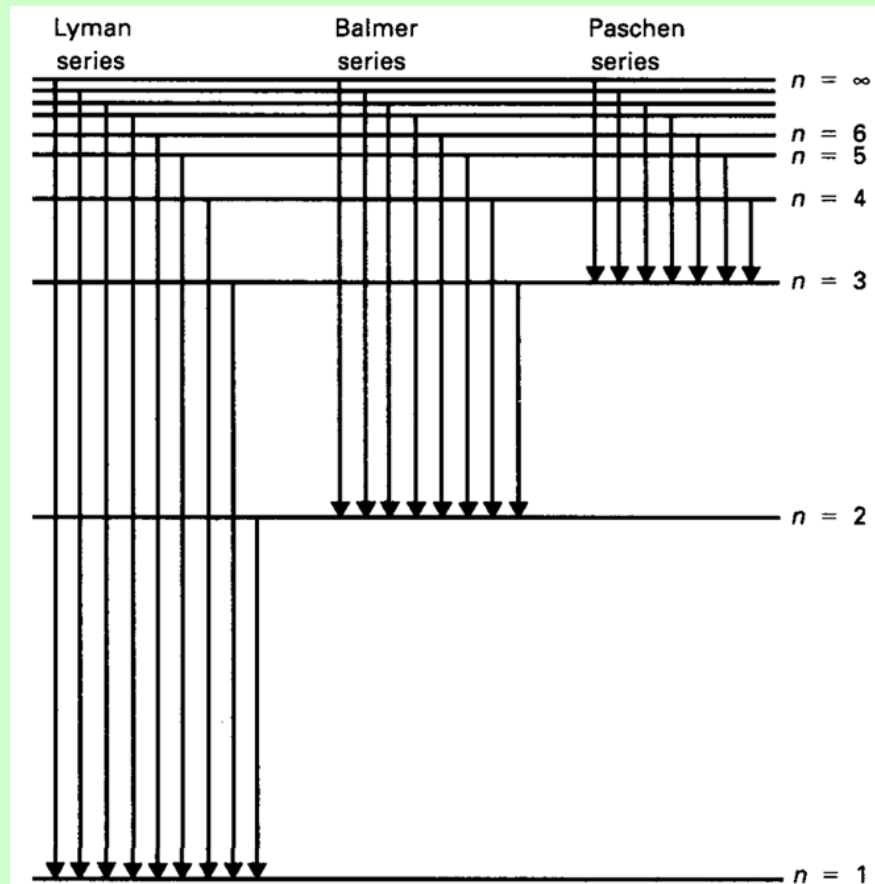
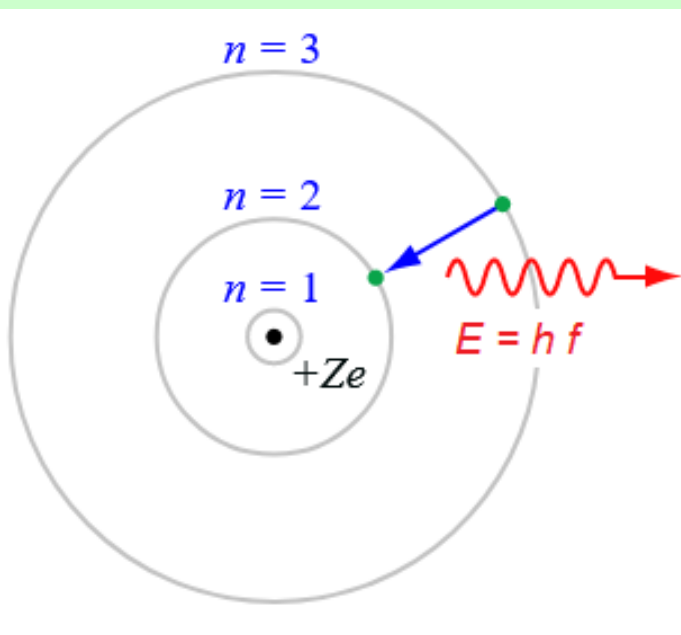
- do (c) dosadíme z (b) a dostáváme  $E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$

- 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