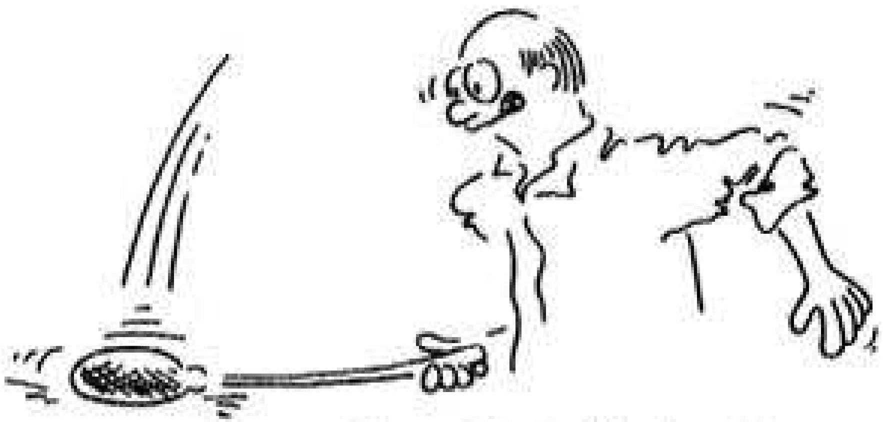
pravděpodobnostní charakter

Živá moucha zaplňuje celý prostor

$$i\hbar \frac{\partial \left|\psi(t)\right\rangle}{\partial t} = H(t)\left|\psi(t)\right\rangle$$



Rozplácneme-li mouchu, je lokalizována.
Bohužel se tím ale ničí.

Kvantová čísla

Dále uvedené vztahy se týkají situací se sféricky symetrickým potenciálem (Coulombův potenciálV těchto situacích lze současně měřit energii, kvadrát momentu hybnosti, jednu libovolnou komponentu momentu hybnosti a spin.

n *Hlavní kvantové číslo*. Čísluje energetické stavy (řešení rovnice pro vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru). Tyto hodnoty závisí na předpisu pro potenciální energii a jsou případ od případu různé.

l *Vedlejší kvantové číslo*. Čísluje velikost momentu hybnosti. Jde o řešení rovnice pro vlastní hodnoty operátoru kvadrátu momentu hybnosti. $b^2 = l(l+1)\hbar^2, \; l = 0, 1, 2, \cdots$

m *Magnetické kvantové číslo*. Čísluje projekci momentu hybnosti do libovolné osy. Jde o řešení rovnice pro vlastní hodnoty operátoru libovolné komponenty momentu hybnosti. Tato rovnice poskytuje řešení:

Moment hybnosti nabité částice souvisí jednoduchým vztahem s magnetickým momentem částice (**μ** = Q**b**/2m). Proto se toto číslo nazývá magnetické kvantové číslo.

$$b_z = m\hbar, \qquad m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l$$

s *Spinové kvantové číslo*. Spin je veličinou souvisící se symetrií rovnic vzhledem k Lorentzově transformaci. Odpovídá rotaci mezi časovou a prostorovou osou ve čtyřech dimenzích. Přirozeným způsobem se skládá s momentem hybnosti, který souvisí se symetriemi vzhledem k prostorovým rotacím. $S^2 = s(s+1)\hbar^2, \; s = 0, 1/2, 1, \cdots$

s_z *Projekce spinu*. Čísluje projekci spinu do libovolné osy. Jde o analogii magnetického kvantového čísla pro moment hybnosti.

$$S_z = s_z\hbar, \qquad s_z = -s, -s+1, \cdots, s-1, s$$

Vlastnosti elektronu v atomovém obalu

stav elektronu je jednoznačně určen 4 kvantovými čísly:

n – hlavní kvantové číslo – určuje energii elektronu v poli jádra:

$$\boxed{E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \qquad n = 1,2,3,\ldots}$$

l – vedlejší kvantové číslo – velikost orbitálního momentu hybnosti:

$$\boxed{L = \sqrt{l\cdot(l+1)}\cdot\hbar \qquad l = 0,1,2,3,\ldots,n-1}$$

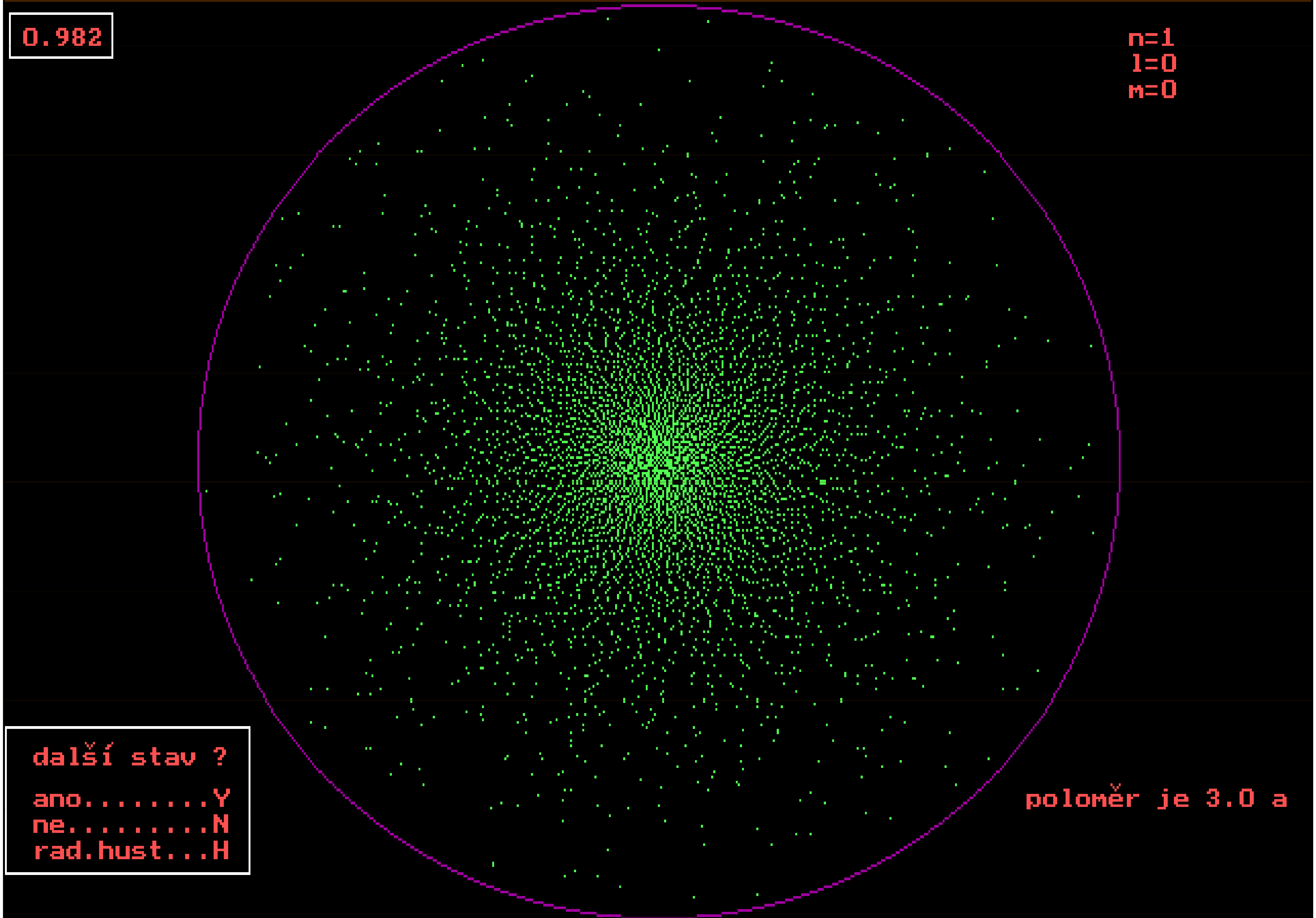
m – magnetické kvantové číslo – složka orbitálního momentu hybnosti:

$$\boxed{L_z = m\cdot\hbar \qquad m = -l,-l+1,\ldots,-1,0,1,\ldots l-1,l}$$

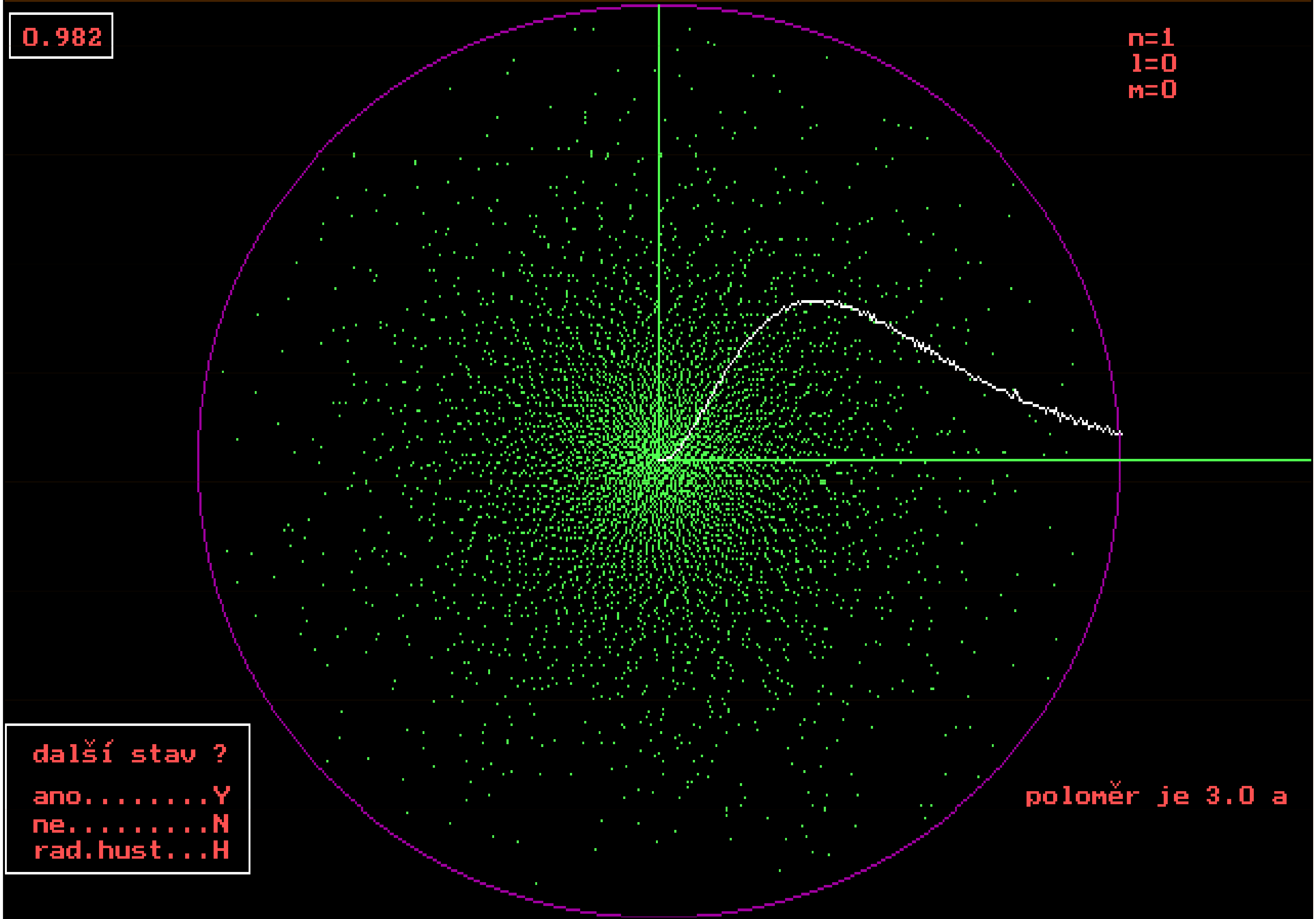
m_s – spinové kvantové číslo – složka vlastního momentu hybnosti:

$$\boxed{S_z = m_s\cdot\hbar \qquad m_s = -\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$$

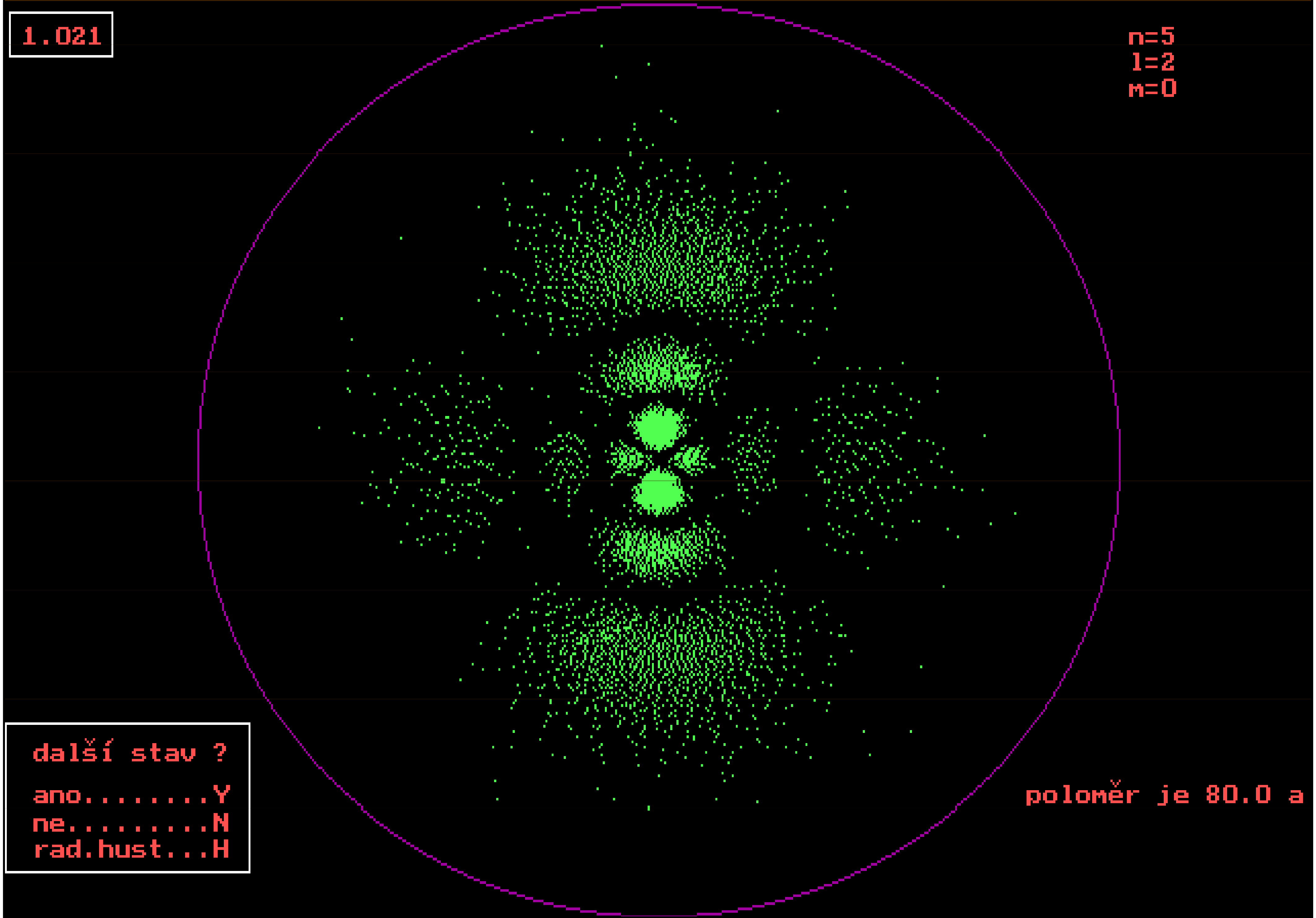
atom vodíku v základním stavu



nejpravděpodobnější vzdálenost elektronu od jádra



atom vodíku v excitovaném stavu



poznámky a komentář:

Spin – souhrnné označení vlastností mikročástic, které souvisejí s existencí vlastního momentu hybnosti. U klasických objektů vzniká vlastní moment hybnosti rotací kolem osy procházející těžištěm. U mikročástic je tato vlastnost postulována (spory s teorií relativity).

Proč není kvantována velikost spinového momentu hybnosti?

U každého momentu hybnosti může složka nabývat $2s + 1$ hodnot, kde s je kvantové číslo určující velikost momentu hybnosti. Protože v případě spinového momentu hybnosti je $2s + 1 = 2$, platí:

$$s = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad S = \sqrt{s \cdot (s+1)} \cdot \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar$$

Podle velikosti n se elektrony dělí do slupek: K, L, M, N, …

Podle velikosti l se elektrony dělí do orbitů (drah): s, p, d, f, …

Nejznámější projevy spinu: dublety ve spektru (Na 589,0 nm + 589,6 nm), Sternův-Gerlachův pokus

relace neurčitosti

Nekomutativnost aktu měření	*Měření v mikrosvětě závisí na pořadí.* Měříme-li např. kinetickou energii a polohu částice, dostaneme různé výsledky podle pořadí měření.
Neurčitost měření	*Některé veličiny nelze současně měřit s neomezenou přesností* (naprí. polohu a rychlost). Existuje jistá principiální hranice, kterou nelze překročit, daná Heisenbergovými relacemi neurčitosti.

$$\boxed{\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

1. Heisenbergova relace neurčitosti

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

2. Heisenbergova relace neurčitosti

Werner Heisenberg (1901-1976)

příklady:

dvojí filosofický výklad

důsledky a projevy

princip totožnosti

Částice se stejnými fyzikálními vlastnostmi jsou navzájem nerozlišitelné.

$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$ částice, které se řídí tímto vztahem jsou **bosony**

$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=-\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$ částice, které se řídí tímto vztahem jsou **fermiony**

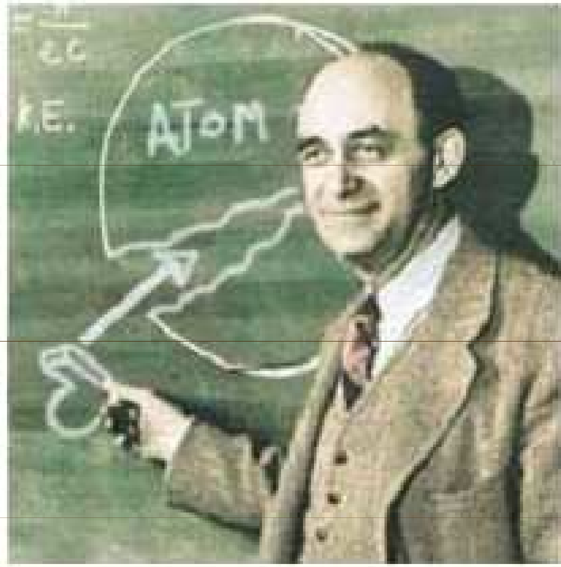
Třídy částic mají názvy podle statistických rozdělení, kterými se skupiny částic daného typu řídí: Boseho-Einsteinovo a Fermiho-Diracovo

Paulův princip

pro fermiony platí **Pauliův vylučovací princip**:

V soustavě stejných fermionů nemohou existovat 2 fermiony v totožném stavu.

Wolfgang Pauli (1900-1958)



Enrico Fermi (1901-1954)

Paul Dirac (1902-1984)

pro fermiony platí **Pauliův vylučovací princip**:

V soustavě stejných fermionů nemohou existovat 2 fermiony v totožném stavu.

Wolfgang Pauli (1900-1958)

Pauliův vylučovací princip pro elektrony v atomovém obalu:

V elektronovém obalu atomu nemohou existovat dva elektrony, které by měly všechna 4 kvantová čísla stejná.

slupka	n	l	m	m_s
K	1	0	0	½
K	1	0	0	-½
L	2	0	0	½
L	2	0	0	-½
L	2	1	-1	½
L	2	1	-1	-½
L	2	1	0	½
L	2	1	0	-½
L	2	1	1	½
L	2	1	1	-½

Výpočet maximálního počtu elektronů v n-té slupce:

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2\cdot(2l+1) = 2\cdot\frac{n}{2}\left\{\left[2(n-1)+1\right]+1\right\} = 2n^2$$

počet možných m_s

počet možných l

počet možných m

Orbitální a spinový magnetický moment

Elektron s $l \neq 0$ má orbitální moment hybnosti (v klasické fyzice je to spojeno s křivočarým pohybem), má náboj (-e), z toho plyne, že se chová jako závit protékaný stejnosměrným elektrickým proudem, proto má i **orbitální magnetický moment**.

Poměr složek orbitálního magnetického momentu a orbitálního momenty hybnosti je konstantní:

$$\frac{M_z}{L_z} = -\frac{e}{2m_0} \quad \Rightarrow \quad M_z = -m \cdot \frac{e\hbar}{2m_0} \qquad \boxed{M_z = -m\mu_B, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0}}$$

$$\mu_B = 9{,}27 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{J \cdot T^{-1}}$$ Bohrův magneton

Mikročástice mají vlastní moment hybnosti a vlastní magnetický moment (jako postulát, později vyplynulo z relativistické kvantové teorie Diraca).

$$\boxed{\frac{M_{sz}}{S_z} = -\frac{e}{m_0} \quad \Rightarrow \quad M_{sz} = -m_s \cdot \frac{e\hbar}{m_0} = -2m_s \cdot \mu_B}$$

Základním vztahem pro energii je energie elektronu v poli jádra:

$$\boxed{E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \quad n = 1,2,3,....}$$

I když je v obalu jediný elektron, není uvedená energie jediným příspěvkem k celkové energii. Pokud má elektron nenulové vedlejší kvantové číslo, má i nenulový orbitální magnetický moment. Protože má zároveň i spinový magnetický moment, vzniká interakcí těchto momentů (které mohou být různě velké a různě orientované, přídavná energie, která může nabývat 2*l* + 1 různých hodnot - spin-orbitální interakce – vysvětlení jemné struktury spektrálních čar. Z toho vyplývá, že energie elektronu závisí i na vedlejším, magnetickém a spinovém kvantovém čísle:

$$E = E_n + \Delta E_{ls}$$

V obalu je více elektronů: k předchozí energii přispupují další přídavné energie, které vznikají interakcí elektronů mezi sebou:

- Coulombovská interakce elektronů mezi sebou
- interakce orbitálních magnetických momentů $l_i \leftrightarrow l_j$
- interakce orbitálních a spinových magnetických momentů $l_i \leftrightarrow s_j$
- výměnné interakce
- interakce $l_i \leftrightarrow s_i$
- interakce $s_i \leftrightarrow s_j$

- interakce orbitálních a spinových magnetických momentů elektronů s magnetickým momentem jádra

Periodická soustava prvků

1869 Mendělejev

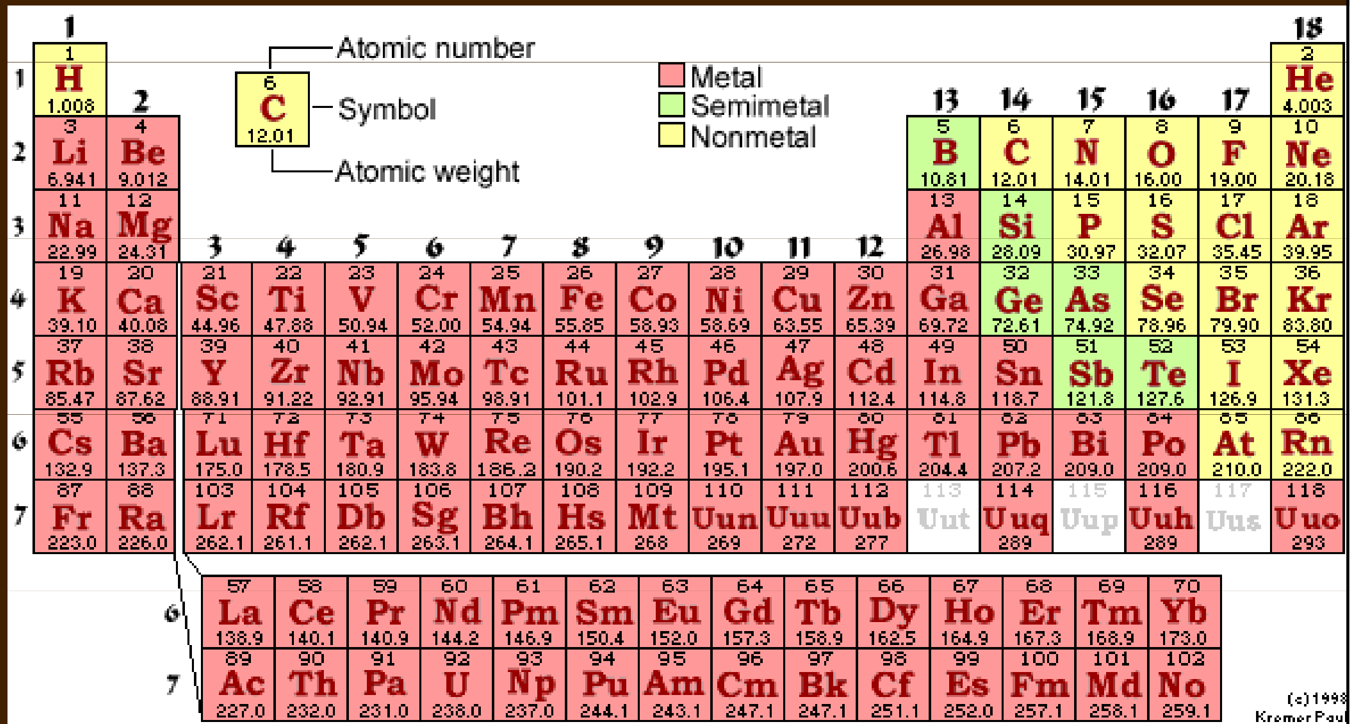
Prvky vypsal spolu s atomovými „vahami“ na papírky, seřazoval je do řádek. Když narazil na skokovou změnu v chemických a fyzikálních vlastnostech (F-Na, Cl-K), začal novou řádku. Hlavním úspěchem tohoto uspořádání byla předpověď nových prvků:

ekaaluminium – gallium

ekabór – scandium

ekasalicium – germanium

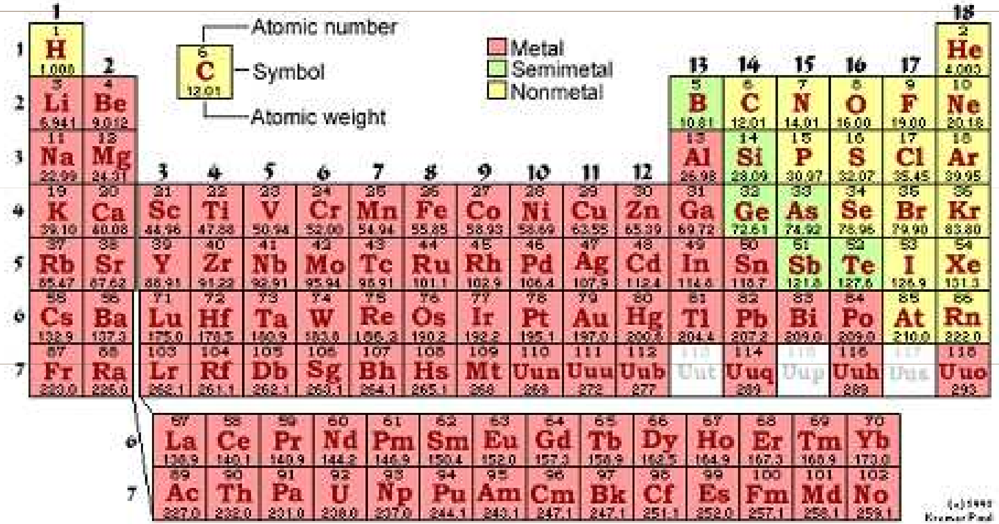
Dimitrij Ivanovič Mendělejev (1834-1907)



Hundova pravidla: pořadí zaplňování stavů se řídí součtem $n + l$, jsou-li 2 kombinace rovny, přednost má kombinace s menším n; pokud je to možné, zaujímají elektrony stavy se stejným m_s

1s					1
2s					2
2p	3s				3
3p	4s				4
3d	4p	5s			5
4d	5p	6s			6
4f	5d	6p	7s		7
5f	6d	7p	8s		8

1s	2
2s, 2p	2 + 6 = 8
3s, 3p	2 + 6 = 8
4s, 3d, 4p	2 +10 + 6 = 18
5s, 4d, 5p	2 +10 + 6 = 18
6s, 4f, 5d, 6p	2 +14 +10 + 6 = 32
7s, 5f, 6d, 7p	2 +14 +10 + 6 = 32



valenční sféra, valenční elektrony:
chemické vlastnosti

elektronový oktet sp: netečné plyny

alkalické kovy

halogeny

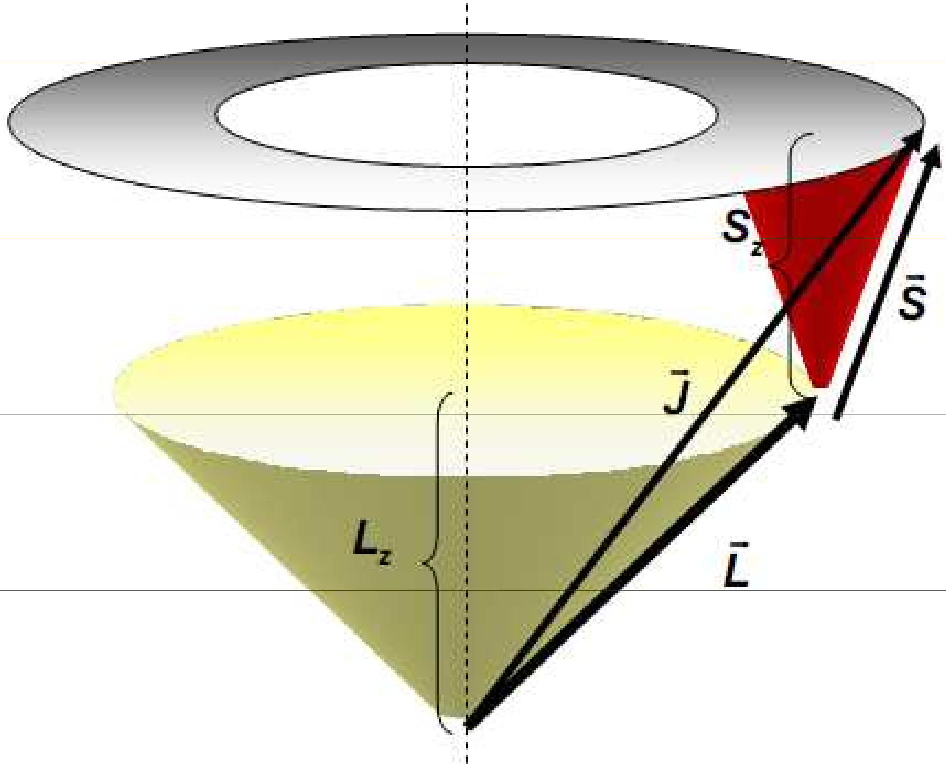
lanthanoidy $_{57}La \rightarrow {}_{71}Lu$

aktinoidy $_{89}Ac \rightarrow {}_{103}Lw$

Vektorový model atomu

zabývá se energií elektronového obalu pro atomy s více elektrony bez ohledu na velikosti jednotlivých kvantových čísel elektronů

Základní myšlenka: 1 elektron má 2 momenty hybnosti, které nejsou dokonale poznatelné, můžeme určit jen velikost a jednu složku. Součet těchto vektorů by byl „rozmazán“ daleko více než kterýkoli z původních vektorů.



Vektorový model atomu

Celkový (úhrnný) moment hybnosti musí být kvantován jako každý jiný moment hybnosti:

$$J = \sqrt{j \cdot (j+1)} \cdot \hbar \qquad J_z = m_j \hbar$$

Velikost orbitálního momentu hybnosti je dána kvantovým číslem *l*, spinový může vůči němu zaujímat dva různé směry. Kvantové číslo *j* proto nabývá nejvýše dvou hodnot:

$$j = l + \frac{1}{2}, \left| l - \frac{1}{2} \right| \qquad \left(\text{při } l = 0 \text{ je pouze } j = \frac{1}{2} \right)$$

Kvantové číslo m_j pak může nabývat $2j + 1$ hodnot:

$$m_j = -j, -j+1, \ldots, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, \ldots, j-1, j$$

Pro *N* elektronů je zavedení celkového momentu hybnosti všech elektronů ještě významnější, protože změna energie elektronového obalu závisí na změnách celého obalu. Při určování celkového momentu hybnosti elektronového obalu je vzhledem k neurčitosti možné použít dvou postupů:

Pro lehčí atomy je vhodnější způsob označovaný LS:

$$\vec{L} = \sum \vec{L}_i \quad \vec{S} = \sum \vec{S}_i \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Pro těžší atomy je vhodnější způsob označovaný jj:

$$\vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i \quad \vec{J} = \sum \vec{J}_i$$

Kvantování všech 3 momentů hybnosti elektronového obalu:

$$\mathcal{L} = \sqrt{L \cdot (L+1)} \cdot \hbar \quad \mathcal{L}_z = m_L \hbar \qquad L = 0, 1, 2, \ldots, \sum l_i \quad m_L = -L, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, +L$$

$$\mathcal{S} = \sqrt{S \cdot (S+1)} \cdot \hbar \quad \mathcal{S}_z = m_S \hbar \qquad \text{pro } n \text{ sudé:} \quad S = 0, 1, 2, \ldots, \frac{n}{2} \quad m_S = -S, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, +S$$

$$\text{pro } n \text{ liché:} \quad S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots, \frac{n}{2} \quad m_S = -S, \ldots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \ldots, +S$$

$$\mathcal{J} = \sqrt{J \cdot (J+1)} \cdot \hbar \quad \mathcal{J}_z = m_J \hbar \qquad J = L+S, L+S-1, \ldots, |L-S| \quad m_J = -J, -J+1, \ldots, J-1, J$$

$$2S+1 \text{ hodnot pro } L > S, \; 2L+1 \text{ hodnot pro } S > L$$

Pořadí příspěvků k energii od vzájemných interakcí:

Pro lehčí atomy LS:

1. výměnná energie
2. Coulombovské odpuzování
3. spin-orbitální interakce

Pro těžší atomy jj:

1. spin-orbitální interakce
2. Coulombovské odpuzování
3. výměnná energie

Stavy s různými čísly *L, S, J* mají různé energie.

Plně obsazené orbity k *L, S, J* nepřispívají (opačné orientace se odečtou).

Označení energetické hladiny: term $(n)\,^{2S+1}L_J$

multiplicita

značí se písmeny *S, P, D, ...*

Ne všechny kombinace trojic *LSJ* jsou možné (Puliův vylučovací princip).

Příklad:

2 elektrony na orbitě p ($l = 1$)

$$\left.\begin{array}{l} \text{teoreticky: } L = 0, 1, 2 \\ S = 0, 1 \\ J = 0, 1, 2, 3 \end{array}\right\}\ \text{24 stavů}$$

$$\text{ve skutečnosti:}\quad \left.\begin{array}{l} m = 1, \quad m_s = \pm\frac{1}{2} \\ m = 0, \quad m_s = \pm\frac{1}{2} \\ m = -1, \quad m_s = \pm\frac{1}{2} \end{array}\right\}\ \frac{6 \cdot 5}{2} = 15 \text{ stavů}$$

Kolika různých energií mohou tyto stavy nabývat?

m_1	m_2	m_{s1}	m_{s2}	L	S	J	term
1	1	↑	↓	2	0	2	$^1D_2$
1	0	↑	↑	1	1	2	$^3P_2$
1	0	↓	↓	1	1	0	$^3P_0$
1	0	↑	↓	1	0	1	$^1P_1$
1	0	↓	↑	1	0	1	$^1P_1$
1	-1	↑	↑	0	1	1	$^3S_1$
1	-1	↓	↓	0	1	1	$^3S_1$
1	-1	↑	↓	0	0	0	$^1S_0$
1	-1	↓	↑	0	0	0	$^1S_0$
0	0	↑	↓	0	0	0	$^1S_0$
-1	0	↑	↑	1	1	0	$^3P_0$
-1	0	↓	↓	1	1	2	$^3P_2$
-1	0	↑	↓	1	0	1	$^1P_1$
-1	0	↓	↑	1	0	1	$^1P_1$
-1	-1	↑	↓	2	0	2	$^1D_2$

základní term
(s minimální energií)