MASARYKOVA UNIVERZITA
Přírodovědecká fakulta
Ústav chemie

Bakalářská práce

Brno 2022 Martin Bureš

MASARYKOVA
UNIVERZITA
Přírodovědecká fakulta
Ústav chemie

Didaktika elektronové struktury atomů

Bakalářská práce

Martin Bureš

Vedoucí práce: doc. Mgr. Markéta Munzarová, Dr. rer. nat. **Brno 2022**

Bibliografický záznam

Autor:	Martin Bureš Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita Ústav chemie
Název práce:	Didaktika elektronové struktury atomů
Studijní program:	Fyzika
Studijní obor:	Fyzika se zaměřením na vzdělávání, Chemie se zaměřením na vzdělávání
Vedoucí práce:	doc. Mgr. Markéta Munzarová, Dr. rer. nat.
Akademický rok:	2021/2022
Počet stran:	93
Klíčová slova:	kvantová chemie; vlnově-částicový dualismus; vlnová funkce; Schrödingerova rovnice; někonečně hluboká potenciálová jáma; podivnosti kvantové mechaniky; atom vodíku; orbitaly; kvantová čísla

Bibliographic Entry

Author:	Martin Bureš Faculty of Science, Masaryk University Department of chemistry
Title of Thesis:	Electronic structure of atoms: A didactical study
Degree Programme:	Physics
Field of Study:	Physics with a view to Education, Chemistry with a view to Education
Supervisor:	doc. Mgr. Markéta Munzarová, Dr. rer. nat.
Academic Year:	2021/2022
Number of Pages:	93
Keywords:	quantum chemistry; wave-particle duality; Schrödinger equation; infinite potential well; strange properties of quantum mechanics; hydrogen atom; orbitals; quantum numbers

Abstrakt

Tato práce se věnuje výkladu kvantové teorie pro poslední ročníky středních škol. V první kapitole jsou shrnuty základní vlastnosti vln a částic a je nastíněn vlnově-částicový dualismus. Ve druhé kapitole je s použitím minimalistického matematického aparátu vyřešena Schrödingerova rovnice pro jednorozměrnou nekonečně hlubokou potenciálovou jámu. Stejné řešení je následně nalezeno na základě paralely se stojatou vlnou. Ve třetí kapitole jsou představeny některé podivnosti kvantové mechaniky, tedy vlastnosti mikrosvěta, na které nejsme zvyklí z klasické fyziky. Jedná se především o kvantování fyzikálních veličin a pravděpodobnostní charakter. Poslední kapitola se věnuje atomu vodíku, konkrétně pojmům, které bývají studenty středních škol často špatně pochopeny: kvantová čísla a atomové orbitaly.

Abstract

This thesis is about an interpretation of quantum theory suitable for senior high school students. In the first chapter, there is a summary of basic properties of particles and waves and wave-particle duality is outlined. In the second chapter, there is a step by step solution to Schrödinger equation for infinite potential well using only minimalistic mathematical apparatus. Also, a solution using a paralell with standing wave is provided. In the third chapter, student can be introduced to some of the strange properties od quantum mechanics (properties we are not used to in classical physics). Mainly quantization of physical quantities and probabilistic character is discussed. The last chapter is about the hydrogen atom and closer attention is paid to concepts which tend to be misinterpreted by students: quantum numbers and atomic orbitals.

MUNI
SCI

MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
KOTLÁŘSKÁ 2, 611 37 BRNO
IČ: 00216224
DIČ: CZ00216224

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Akademický rok: 2021/2022

Ústav:	Ústav chemie
Student:	Martin Bureš
Program:	Fyzika
Obor:	Fyzika se zaměřením na vzdělávání Chemie se zaměřením na vzdělávání

Ředitel *ústavu* PřF MU Vám ve smyslu Studijního a zkušebního řádu MU určuje bakalářskou práci s názvem:

Název práce:	Didaktika elektronové struktury atomů
Název práce anglicky:	Electronic structure of atoms: A didactical study
Jazyk závěrečné práce:	čeština

Oficiální zadání:
Úkolem studenta je napsat učební text na téma Didaktika elektronové struktury atomů. Text by měl být primárně formulován pro studenty závěrečných ročníků středních škol v rámci výuky v seminářích z chemie. Doplňkově by mohl sloužit jako studijní pomůcka ke kvantově-chemickým kapitolám předmětu Fyzikální chemie pro studenty bakalářského studijního programu Chemie se zaměřením na vzdělávání. Základní didaktický důraz je třeba položit na shrnutí základních fyzikálních konceptů popisujících chování částic resp. vln, neboť se jedná o text určený pro studenty chemie, nikoli fyziky. První kapitola by dále měla seznámit čtenáře se základními experimenty, které vedly ke vzniku kvantové mechaniky. Ve druhé kapitole by měl student ilustrovat principy kvantově-mechanického popisu na nejjednodušším možném modelovém systému: částici v jednorozměrné potenciálové jámě. Úkolem třetí části textu je zavedení pojmu atomový orbital a kvantová čísla pro atom vodíku.

Literatura:
LOWE, John P. *Quantum chemistry*. 2nd ed. San Diego: Academic Press, 1993. xx, 711. ISBN 0124575552.

Vedoucí práce:	doc. Mgr. Markéta Munzarová, Dr. rer. nat.
Datum zadání práce:	15. 11. 2021
V Brně dne:	22. 12. 2021

Zadání bylo schváleno prostřednictvím IS MU.

Martin Bureš, 17. 12. 2021
doc. Mgr. Markéta Munzarová, Dr. rer. nat., 16. 12. 2021
doc. Mgr. Marek Nečas, Ph.D., 17. 12. 2021

Poděkování

Chtěl bych upřímně poděkovat své školitelce, doc. Mgr. Markéta Munzarové, Dr. rer. nat., za vedení své bakalářské práce. Jsem vděčný za její cenné připomínky k textu a také za to, že se mne v každé situaci snažila motivovat k dokončení práce. Dále bych chtěl poděkovat své přítelkyni Šárce Kotasové za její neúnavnou emocionální podporu a také za to, že si přečetla celý text a dala mi k němu cenné náměty.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svoji bakalářskou práci vypracoval samostatně pod vedením vedoucího práce s využitím informačních zdrojů, které jsou v práci citovány.

Brno 9. ledna 2022 . . . . . .

Martin Bureš

Obsah

Úvod **1**

Kapitola 1. Svět vln a částic **3**
1.1 Částice, vlny a veličiny je popisující 3
1.2 Fotoelektrický jev (fotoefekt) 7
1.3 De Broglieho teorie 10
1.4 Difrakce elektronu 12
1.5 Matematický popis vln 19

Kapitola 2. Nekonečně hluboká potenciálová jáma **23**
2.1 Schrödingerova rovnice 24
2.2 Vlnová funkce, stav 26
2.3 Vlastnosti vlnové funkce 30
2.4 Řešení Schrödingerovy rovnice pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu 31
2.5 Pravděpodobnost a hustota pravděpodobnosti 35
2.6 Normování vlnové funkce 40
2.7 Řešení pomocí stojaté vlny 42

Kapitola 3. Podivnosti mikrosvěta **45**
3.1 Kvantování fyzikálních veličin 45
3.2 Pravděpodobnostní charakter 55

Kapitola 4. Atom vodíku **61**
4.1 Schrödingerova rovnice pro atom vodíku 61
4.2 Kvantová čísla - možné hodnoty 64
4.3 Význam kvantových čísel 66
4.4 Orbitaly 72
4.5 Grafické znázornění orbitalů 83

Závěr **93**

Seznam použité literatury **95**

Zdroje obrázků **97**

Úvod

Úkolem této bakalářské práce bylo zpracovat téma základů kvantové fyziky a chemie tak, aby mu porozuměl student posledního ročníku střední školy, který teorii mikrosvěta rozumět chce a/nebo potřebuje. Úlohy chemické olympiády v posledních letech zrcadlí význam kvantové teorie v moderní fyzikální chemii, aniž by středoškolští studenti, a často i jejich učitelé, měli možnost absolvovat odpovídající teoretickou průpravu. Tento text by mohl být prospěšný také studentům nižších ročníků vysokých škol chemických oborů jako doplněk kurzů obecné a fyzikální chemie. Právě kvantová teorie patří k obtížnějším partiím bakalářského i magisterského stupně studia chemie a bakalářské či diplomové práce studentů učitelství chemie se jí častěji vyhýbají než věnují.

Speciální kategorií pedagogických výzev je otázka, jak podat nadaným studentům prvních ročníků čtyřletých a pátých ročníků osmiletých gymnázií tematiku atomových orbitalů, na níž pak stojí celý další výklad středoškolské chemie. Vzhledem k tomu, že výklad v první kapitole této práce je veden opravdu od úplných počátků a je v něm představen pokročilejší matematický aparátu, mohl by částečně uspokojit a vhodně podpořit zvědavost nadaných dětí a uchránit je frustrace z přijímání faktů, kterým nerozumějí. Tito studenti se totiž v chemii v tomto roce poprvé setkávají s některými výsledky kvantové mechaniky, jako jsou např. pojmy orbital,nebo kvantová čísla. Jelikož na střední škole nebývá v chemii na toto téma příliš mnoho času, jsou tyto výsledky podávány bez jakékoliv souvislosti s fyzikou, nebo bývají místy interpretovány i zavádějícím způsobem. Dále je text samozřejmě doporučen všem učitelům chemie a fyziky, kteří by rádi do svých seminářů toto pokročilé učivo zařadili.

Důvodem, proč jsem si toto téma bakalářské práce zvolil, je fakt, že jsem studentem učitelství fyziky a chemie a do jisté míry vím, s jakými problémy se při studiu kvantové teorie potýkají studenti obou těchto oborů. Vzhledem ke své kombinaci jsem měl také možnost nahlédnout do různých přístupů, kterými je kvantová teorie vyučována a pochopit ji z různých úhlů a na různých stupních obtížnosti.

Úkolem této práce rozhodně není vysvětlit pokročilejší partie teorie mikrosvěta, jako jsou např. postuláty kvantové mechaniky nebo popis složitějších systémů, jako jsou atomy s více elektrony. Mimo záběr práce je i chemická vazba, jakkoli se jedná o centrální téma středoškolské chemie.. Úkolem této práce naopak je seznámení se základní principy kvantové teorie srozumitelnou formou. Výklad je veden tak, aby dával do souvislostí již známou látku středoškolské fyziky s novými, zde představenými zákonitostmi. Práce se přitom snaží se držet zásady, že méně znamená více a snaží se namísto výčtu mnoha faktů raději pečlivě objasňovat a stále připomínat základní poznatky. Důvodem zvolení této taktiky je především to, že kvantová teorie patří mezi nejobtížnější vědecké disciplíny se, kterými se student střední školy vůbec setká. Dalším důvodem je skutečnost, že pokud se

student dobře naučí základy a porozumí jim, pak si může sám dostudovat různé aplikace a pěstovat tak samostatné myšlení.

Tato práce je rozdělena do čtyř kapitol. První kapitola shrnuje nejdůležitější vlastnosti částic a vln, které jsou většinou učivem fyziky druhých a třetích ročníků čtyřletého středoškolského studia. Speciální podkapitola 1.5 je věnována matematickému popisu vln. Je to oblast, která bývá na středních školách ve fyzice často opomíjena: buď není dostatečně pokryta, nebo není dostatečně matematizována. Tento důvod úzce souvisí s nedostatečnou hodinovou dotací fyziky. V první kapitole je také představen jeden z nejdůležitějších konceptů, díky němuž se z klasické fyziky zrodila kvantová teorie: de Broglieho hypotéza. I tento zrod kvantové teorie je většinou opakováním fyziky čtvrtého ročníku střední školy. Čtenář s dobrými znalostmi středoškolské fyziky a matematiky může přeskočit rovnou ke druhé kapitole a může se k první kapitole vrátit pouze v případě potřeby.

Druhá kapitola je věnována nejjednoduššímu kvantovému systému, konkrétně nekonečně hluboké potenciálové jámě. Tento systém proto, že je matematicky nejjednodušší a má přímé chemické i fyzikální aplikace, které jsou v práci zmíněny. Celá druhá kapitola se týká vysvětlení jednotlivých členů Schrödingerovy rovnice a pojmu vlnová funkce. Dále se zaobírá nalezením řešení Schrödingerovy rovnice pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu. Tato řešení jsou také získána porovnáním s popisem stojaté vlny. Vše je průběžně doplňováno nezbytným matematickým aparátem.

Třetí kapitola si klade za cíl objasnění významu výsledků předcházející kapitoly. Poukazuje se v ní na několik několik zákonitostí, na které nejsme zvyklí z klasické fyziky. Především se jedná o zákonitost kvantování přípustných hodnot fyzikálních veličin, podle níž dostala kvantová teorie své jméno, a o pravděpodobnostní charakter popisu mikrosvěta.

Poslední kapitola se týká aplikací dosud vybudovaného aparátu na atom vodíku. Značná pozornost je věnována základním nedorozuměním, k nimž je možné v časově omezeném středoškolském pojetí dospět. Jedná se především o původ a význam kvantových čísel, význam pojmu orbital, a významu grafického znázorňování orbitalů.

Kapitola 1

Svět vln a částic

Nejprve bychom si měli něco povědět o světě, jak ho chápali fyzikové před vznikem kvantové fyziky a chemie. Do jisté míry je to představa světa, kterou mají mnozí lidé dodnes. Již od nepaměti jsme měli snahu rozdělovat jednotlivé jevy do různých skupin a poté je vysvětlovat. Jen si vzpomeňte na své předchozí studium fyziky. I přestože fyzika studuje najednou celou přírodu, tak pokud jsme řešili padající kámen, mluvili jsme o mechanice. Pokud jsme řešili změny skupenství vlivem přenosu tepla, mluvili jste o molekulové fyzice a termice. Tyto snahy jsou lidskému mozku vlastní, chce si „rozškatulkovat“ dané komplexní děje na nějaké jednodušší, a pak na ně použít zákonitosti, které již zná z podobných případů.

Z toho důvodu si fyzikové rozdělili objekty našeho světa na vlny a částice. V 19. století již bylo poměrně jasné, které fyzikální jevy lze vysvětlit interakcí částic a které interakcí vln. Částicový přístup využíváme pro popis pohybů těles v klasické mechanice nebo některých jevů v molekulové fyzice. Vlnový přístup můžeme uplatnit při popisu zvuku, vln na vodě nebo třeba světla.

Jen pro připomenutí uvádíme, že mechanika je oblast fyziky, která řeší, jak a proč se věci pohybují. Přídomek klasické přidáváme z toho důvodu, že se jedná o mechaniku, kterou dobře známe z našeho života a našeho předcházejícího studia z fyziky. Kromě klasické fyziky existuje ještě fyzika kvantová, ke které se v této práci budeme snažit dostat.

Tato část byla inspirována texty: [1][2].

1.1 Částice, vlny a veličiny je popisující

V tuto chvíli by bylo dobré uvést, čím jsou charakteristické vlny a částice a jek se od sebe navzájem liší. Jistě už spoustu těchto informací znáte z fyziky a budou pro vás opakováním. **Částice** si můžeme představit jako kuličky. U pohybující se kuličky jsme schopni určit relativně přesně její hmotnost, rychlost, energii.

Pojmem *relativně přesně* rozumíme to, že v klasické mechanice neexistují principiální omezení přesnosti, s níž jsme schopni hmotnost a rychlost změřit. Pokud bychom měli stále lepší přístroje, tak by se nám dařilo změřit hmotnost a rychlost stále přesněji. Na tomto místě jen prozradíme, že v kvantové mechanice naopak existuje principiální (ne jen technické) omezení přesnosti, s níž lze rychlost a polohu současně určit.

Z polohy, rychlosti, hmotnosti a znalosti působících sil jsme dál schopní určit jakékoliv jiné veličiny týkající se mechaniky, např. mechanickou energii částice. Dále ještě připomeňme veličinu hybnost. Na tomto místě bude stačit, že hybnost (označovaná $\vec{p}$) se získá vynásobením rychlosti a hmotnosti.

$$\vec{p} = m\vec{v} \tag{1.1}$$

kde m je hmotnost a $\vec{v}$ je rychlost. Ještě jednou shrňme, že u částic se dá relativně přesně měřit poloha, hmotnost, rychlost a energie.

Tyto veličiny navíc částici charakterizují. Dalo by se o nich mluvit jako o veličinách určující stav tělesa. Pojmem **stav** ve fyzice označujeme minimální informaci, kterou musím o daném objektu vědět, abych aparátem dané disciplíny byl schopen získat všechny relevantní informace. Tuto větu doporučujeme čtenářům si zapamatovat, neboť stav hraje v kvantové mechanice zásadní roli. Nebojte se, pokud jste přesně nepochopili její význam. Bude v textu ještě připomenuta a blíže vysvětlena na příkladu.

Nyní bychom se již měli věnovat zásadním veličinám, které popisují vlny. Nejprve bychom si měli připomenout, co si věda představuje pod pojmem vlnění. **Vlnění** je děj, při němž se prostorem šíří kmitání.

Kmitáním rozumíme pohyb kolem rovnovážné polohy, který se periodicky opakuje. Jednoduchou představou kmitání může být například kyvadlo hodin nebo pohyb pružiny v tíhovém poli země.

Na tomto místě je nutné ještě uvést, že v případě vlnění se nepřenáší látka, ale pouze energie. Představu o vlnění si lze udělat i tak, že molekuly látky kmitají na svých místech, přitom si předávají energii a tím rozkmitávají i molekuly na jiných místech. Tímto procesem vzniká vlna.

Vlna narozdíl od částice nemá přesnou polohu. Je totiž v prostoru delokalizována, rozprostřena na více místech najednou. Jednoduchou představu o chování si můžeme udělat, hodíme-li kámen do vody. Kolem místa dopadu začínají šířit vodní vlny, u kterých není v principu možné určit jejich polohu, nelze na vodě vytvořit hranici, kde se vlna nachází a kde již ne.

Stejně jako existují charakteristické fyzikální veličiny, které popisují částice, tak i pro vlny lze takové veličiny nalézt. Takovými veličinami jsou frekvence, úhlová frekvence, perioda, vlnová délka a vlnový vektor. Nyní je na čase si připomenout význam těchto veličin. **Frekvence** (f) udává, kolikrát za jednu sekundu se daný jev opakuje. Pokud např. srdce bije 80 krát za minutu, pak je frekvence jeho pulsů $f = 80/60\,\mathrm{Hz} = 4/3\,\mathrm{Hz} = 1,33\,\mathrm{Hz}$ (kde Hz je zkratka jednotky Hertz, základní jednotky frekvence). Tedy za jednu sekundu srdce bije přibližně 1,33krát. Pro popis vlny se však častěji používá veličina zvaná **úhlová frekvence** (ω), která je 2π-násobkem "obyčejné"frekvence f. Pro připomenutí uvádíme vzorec:

$$\omega = 2\pi f \tag{1.2}$$

Další veličinou vhodnou k popisu vln je perioda. **Periodu** lze vysvětlit jako dobu, za níž proběhne jedno opakování. Když nyní spolu srovnáme frekvenci (počet opakování za

jednotku času) a periodu (dobu jednoho opakování), mělo by být zřejmé, že budou mít navzájem převrácené hodnoty:

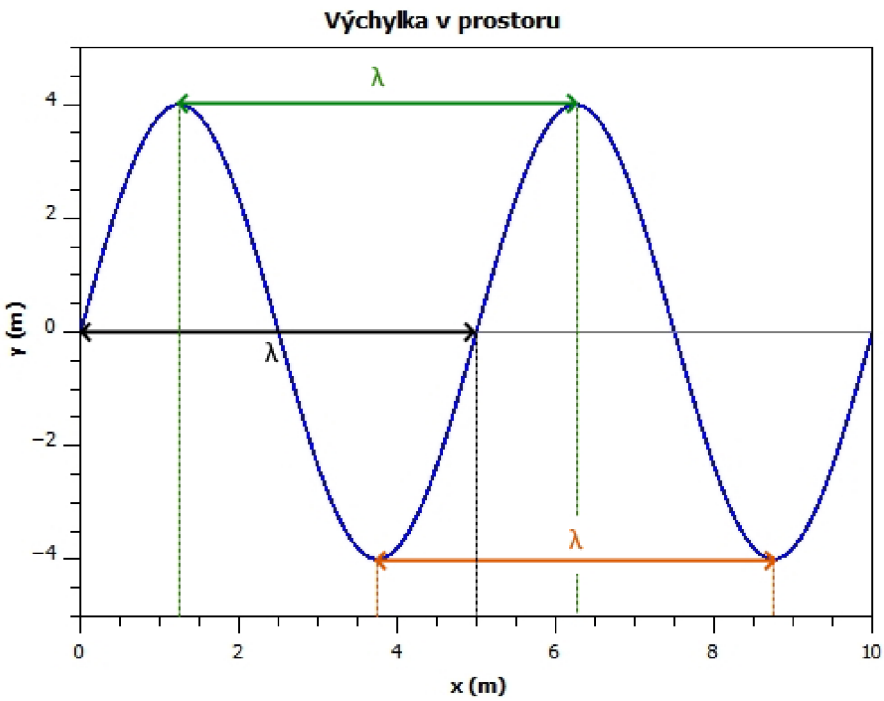
$$T = \frac{1}{f} \tag{1.3}$$

Z rozměrové analýzy můžeme také usoudit, že jednotka Hertz má rozměr s^{-1}. Pokud bychom se opět vrátili k příkladu s tlukoucím srdcem, tak čas mezi dvěma pulsy srdce je:

$$T = \frac{1}{\frac{4}{3}} = \frac{3}{4} = 0,75 \text{ s}$$

Nyní je načase si vysvětlit pojem vlnové délky. **Vlnovou délku** můžeme definovat dvěma způsoby. Pro čtení této práce stačí, aby čtenář rozuměl alespoň jedné z těchto definic. První definice je výpočet z rychlosti šíření vlny:

$$\lambda = vT \tag{1.4}$$



Obrázek 1.1: Znázornění vlnové délky v grafu závislosti výchylky na poloze

S přihlédnutím k tomu, že λ je zmiňovaná vlnová délka. Jelikož se jedná o délku, je její základní jednotkou metr. Vlnová délka by se tedy dala definovat jako vzdálenost, kterou vlna urazí za čas rovný jedné periodě. Další možné vysvětlení vlnové délky je vzdálenost dvou bodů, které kmitají se stejnou okamžitou výchylkou.

Obrázek 1.2: Vlnová délka vlny na hladině

Nakonec se budeme věnovat ještě jedné nové veličině, tzv. vlnovému vektoru ($\vec{k}$). **Vlnový vektor** je vektor, který má směr shodný se směrem šíření vlny a velikost nepřímo úměrnou vlnové délce, kde konstantou úměrnosti je opět konstanta 2π.

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{1.5}$$

Z rozměrové analýzy plyne, že fyzikální jednotkou vlnového vektoru je m^{-1}.

Z předchozích definičních vztahů vyplývá, že z šesti veličin (frekvence, úhlové frekvence, vlnové délky, periody a vlnového vektoru, rychlost šíření vlny) jsou nezávislé pouze dvě. Například zadáním frekvence a vlnové délky lze ostatní dopočítat. Čtenář si to může vyzkoušet tak, že za tyto dvě veličiny zvolí libovolná čísla a zbylým veličinám čísla jednoznačně dopočítá. Pro úplnost ještě dodejme, že i u vlny můžeme hovořit o energii, kterou přenáší. Zvýšenou pozornost věnujte shrnující tabulce 1.1.

Tabulka 1.1: Charakteristické veličiny

fyzikální objekt	charakteristické veličiny
částice	poloha, hmotnost, hybnost, rychlost, mechanická energie
vlna	frekvence, úhlová frekvence, rychlost šíření vlny, vlnová délka, perioda, vlnový vektor

Tato podkapitola byla inspirována texty: [1][2][3][4][5][6].

1.2 Fotoelektrický jev (fotoefekt)

Částicový přístup využíváme pro popis pohybů těles v klasické mechanice nebo některých jevů v molekulové fyzice. Na konci 19. století začali zjišťovat, že existují jevy, které nebylo možné současnou fyzikou vysvětlit. Jako jeden příklad za všechny uveďme tento. Představme si, že svítíme na destičku z alkalického kovu, řekněme třeba sodíku, nějakým zářením, kupříkladu viditelným světlem. Pokud použijeme světlo červené, nedochází k žádnému efektu. Pokud však použijeme světlo modré, můžeme zaznamenat uvolňování elektronů (např. fotografickým papírem). Tento jev se začal nazývat **fotoelektrický jev** nebo také **fotoefekt**.

Světlo (elektromagnetické záření o určité vlnové délce), bylo na konci 19. století považováno za vlnu a všechny pokusy provedené do té doby nasvědčovaly, že tomu tak skutečně je. Problém nastal při snaze vysvětlit právě výše popsaný pokus, konkrétně odlišné chování modré a červené barvy. Energie, kterou vlny předávají, je závislá na její intenzitě (laicky řečeno, jak hodně daný objekt svítí). V tomto případě, pokud jsme použili červené světlo, tak se nedařilo elektrony z kovu „vytřást“ i v případě, že jsme mnohonásobně zvyšovali jeho intenzitu. Naopak modrému světlu stačila poměrně malá intenzita, aby se to podařilo.

Tento fakt se nedařilo na základě vlnové teorie světla vysvětlit. Čtenář by si v této fázi mohl říct, že se prostě vědci spletli a světlo nemá být popisováno jako vlna nýbrž jako částice. Tato teorie jistě také nebude správná, protože světlo vykazuje spoustu vlastností, jako jsou interference nebo difrakce, které nepozorujeme u klasické částice, ale jsou typické pro vlny. Tento rozpor popsal až A. Einstein (v roce 1905) jako skutečnost, že se světlo chová jako vlna i jako částice.

Nyní se vrátíme k situaci, kdy jsme svítili na sodík červeným a modrým světlem. Tento jev lze vysvětlit, pokud se na světlo (ať už červené, nebo modré) díváme jako na proud fotonů. Pokud bychom měli čtenáři odpovědět na otázku, co je to **foton**, řekli bychom, že se jedná o částici světla. Termín foton je pro kvantovou teorii klíčový. Vždy když budeme mluvit o světle a bude nás zajímat jeho částicová povaha, budeme o něm mluvit jako o proudu fotonů.

Foton červeného světla má jinou energii než foton modrého světla. Z Planckova vyzařovacího zákona nám vyplývá, že energie elektromagnetického záření (světlo je konkrétní formou elektromagnetického záření o vlnové délce 390 – 760 nm) se může vyzařovat pouze po tzv. **kvantech**, což znamená, že mezi dvěma částicemi nelze energie předávat spojitě po libovolných částech, ale že každá předaná energie musí být pouze násobkem nějaké základní energie. Jedno kvantum záření odpovídá právě jednomu fotonu. S vlastností kvant a kvantování se jistě během čtení této práce ještě setkáte a bude vám vysvětlena na konkrétních příkladech.

Energii jednoho kvanta/fotonu (E) lze zapsat matematickým vztahem:

$$E = hf \tag{1.6}$$

kde f je frekvence příslušného záření a h je **Planckova konstanta**. Z tohoto vztahu vlastně vyplývá, že energie fotonu závisí pouze na frekvenci použitého záření, a to lineárně. Nyní

použijeme vztah 1.3 a za frekvenci dosadíme do předchozího vzorce převrácenou hodnotu periody. Získáme tedy:

$$E = hf = \frac{h}{T} \tag{1.7}$$

Poté je nutné využít vztahu pro vlnovou délku (1.4) a za periodu dosadit podíl rychlosti a vlnové délky. Jelikož se jedná o rychlost elektromagnetické vlny, používáme pro rychlost označení c (místo v), rychlost světla.

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda} \tag{1.8}$$

Vidíme, že energie fotonu je opět pouze funkcí vlnové délky, protože h i c jsou konstanty. Také vidíme, že je energie vlnové délce nepřímo úměrná. Pokud nyní uvážíme, že vlnová délka modrého světla je přibližně 430 nm a červeného světla 700 nm, můžeme spočítat velikost energie jednoho fotonu modrého a červeného světla. Než však dosadíme do vzorce (1.8) musíme si říct, jaké jsou hodnoty konstant rychlosti světla ve vakuu (c) a Planckovy konstanty (h).

$$c = 299800 \text{ km/s} = 2,998.10^8 \text{ m/s}$$
$$h = 6,626.10^{-34} \text{ J.s}$$

U hodnoty Planckovy konstanty je dobré se na chvíli zastavit. Její hodnota je velmi malé číslo a právě tato její vlastnost je příčinnou toho, že v běžném životě (makrosvětě) kvantování nepozorujeme.

Nyní když už známe obě konstanty, můžeme se dát do počítání jednoho kvanta záření modrého i červeného světla. Nejdříve modré světlo:

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,626.10^{-34}.2,998.10^8}{430.10^{-9}} = 4,6.10^{-19} \text{ J}$$

Červené světlo:

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,626.10^{-34}.2,998.10^8}{700.10^{-9}} = 2,8.10^{-19} \text{ J}$$

U obou vztahů bylo nutné převést nm (nanometry) na základní jednotku, tedy na metr. S přihlédnutím k tomu, že 1 m = 10^9 nm, lze pochopit, jak se ve výpočtu objevilo navíc číslo 10^{-9}. Nyní si ještě musíme zavést jednu nezbytnou fyzikální veličinu, kterou je výstupní práce kovu. **Výstupní práce** je definována jako nejmenší energie, kterou je nutné dodat elektronu, aby se dostal mimo silové působení atomu v pevné látce. Výstupní práce je charakteristická pro každý kov. Pro námi zmiňovaný sodík je výstupní práce 2,3 eV.

Úmyslně jsme čtenáři napsali výstupní práci v elektronvoltech (zkratka eV). Je to totiž jednotka, kterou čtenář nalezne, pokud bude hledat hodnoty výstupních prací v odborné literatuře. My vám nyní vysvětlíme, jak se převádí mezi jednotkami elektronvoltů a základní jednotkou energie joule.

Nejprve je nutné si vyjasnit, co to znamená elektronvolt. Jeden elektronvolt je práce, kterou je nutné vykonat, pokud musíme přemístit elektron mezi dvěma místy, mezi nimiž je napětí 1 volt. Nyní je důležité říct, že náboj elektronu je nazýván elementárním nábojem a jedná se o základní konstantu. Hodnota této konstanty byla určena experimentálně. Čtenáře se zájmem o tuto problematiku odkazujeme na Millikanův pokus např. zde:[6]. Velikost elementární náboje je $e = 1,602.10^{-19}$ C.

V teorii elektřiny a magnetismu bývá zvykem, že se elektrický náboj značí písmenem Q. Pokud se jedná o elementární náboj bývá zvykem mu díky jeho výsadnímu postavení jedné ze základních fyzikálních konstant dávat označení e. Čtenáři pouze připomínáme, že i přes jiné značení se jedná stále jen o konkrétní hodnotu elektrického náboje. Pokud si uvědomíme, že práce v elektrickém poli se spočítá jako součin náboje a napětí (rozdílu mezi dvěma potenciály), pak můžeme psát:

$$W = eU \tag{1.9}$$

kde napětí je z definice 1 V. Po dosazení do vzorce dostáváme:

$$1\text{eV} = 1.1,602.10^{-19}\ \text{J} = 1,602.10^{-19}\ \text{J}$$

Tímto jsme již získali převodní vztah mezi joulem a elektronvoltem. Nyní už je na čase výstupní práci kovu převést na jouly. V našem případě tedy dostáváme:

$$W = 2,3.1.602.10^{-19}\ \text{J} = 3,7.10^{-19}\ \text{J} \tag{1.10}$$

Pokud nyní porovnáme pro nás tři zásadní hodnoty energii modrého fotonu, energii červeného fotonu a výstupní práci snadno docházíme k tomu, že energie červeného světla je nižší než výstupní práce a tudíž svícením červeným světlem na sodík k žádnému efektu nepovede. Na rozdíl od modrého světla, se kterým budeme fotoefekt pozorovat.

Tabulka 1.2: Energie vysvětlující fotoefekt

	červené světlo	modré světlo	výstupní práce
hodnota energie	$2,8.10^{-19}$ J	$4,6.10^{-19}$ J	$3,7.10^{-19}$ J

V této fázi bychom se mohli začít ptát, jaká může být vlnová délka, aby docházelo k fotoefektu. Foton musí mít alespoň takovou energii jako je výstupní práce kovu. Můžeme tedy psát:

$$W \leq \frac{hc}{\lambda} \tag{1.11}$$

Znaménko nerovnosti je zde nutné protože energie fotonu může být větší než výstupní práce a k fotoefektu stále dochází (případ svícení modrého světla na sodík). Pokud nerovnici vynásobíme λ a vydělíme W, tak dostáváme:

$$\lambda \leq \frac{hc}{W} \tag{1.12}$$

Po dosazení:

$$\lambda \leq \frac{6,626.10^{-34}.2,998.10^{8}}{3,7.10^{-19}} = 540 \text{ nm} \tag{1.13}$$

Jen poznamenejme, že výsledek dosazení čísel by vyšel v metrech a ten byl převeden na nanometry. Z výsledné nerovnice je tedy jasné, že pokud chceme, aby probíhal fotoefekt u sodíku, je nutné použít záření, které má nižší vlnovou délku než 540 nm.

Nyní bychom se tedy mohli ptát, jak máme v naší částicové teorii rozumět tomu, když se zvětšuje intenzita světla. Vysvětlení je prosté, zvyšování intenzity světla nemá vliv na zvýšení energie jednotlivých fotonů, ale na zvýšení počtu fotonů. Po tomto zjištění je již jasné, že podmínka nutná k tomu, aby fotoefekt probíhal, je, aby záření mělo prahovou délku vlnového světla, nebo menší. Funguje to prostě nazvaným systémem „všechno, nebo nic“. Pokud už fotoefekt probíhá (máme záření o vhodné vlnové délce), pak zvyšování intenzity světla povede k tomu, že se bude uvolňovat více elektronů, což by pro nás nemělo být žádné zvláštní zjištění. Pokud je totiž více fotonů a každý foton může uvolnit z atomu elektron, pak bude i více uvolněných elektronů.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [1][3][4][6][7][8].

1.3 De Broglieho teorie

Komplexní vysvětlení se pokusil podat až francouzský vědec Louis de Broglie, který tvrzení získané z fotoefektu (světelná vlna je proud částic tzv. fotonů) zobecnil pro všechny částice/vlny. Toto tvrzení by se čtenáři mohlo zdát jako nevýznamné nebo přinejmenším, že de Broglie problém nevyřešil a dal mu jen možnost více interpretací. Nejprve poznamenejme, že de Broglie tímto problém vyřešil a my Vám zde vyjasníme proč.

To, že je nějaký objekt vlnou nebo částicí není vlastnost, která by mu byla dána přírodou, ale je to vlastnost, kterou mu dali lidé, aby ho mohli snadněji matematicky popsat. Takže v některých případech se prostě vyplatí objekt popisovat jako vlnu a v jiných jako částice.

Pokud bychom tedy měli odpovědět na to, co je **de Broglieho teorie**, řekli bychom, že s každou částicí s danou hybností p je spjato vlnění o vlnové délce λ. Pokud má tedy nějaká částice nenulovou hybnost (hmotnost a rychlost), pak je současně vlnou s příslušející vlnovou délkou. Zároveň, pokud má vlna (nenulovou) vlnovou délku, pak je současně částicí s příslušnou hybností. Vztah mezi těmito vlnovými délkami a hybnostmi zachycuje následující rovnice:

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{1.14}$$

kde h je opět Planckova konstanta.

Těmito úvahami jsme ještě nepotvrdili de Broglieho hypotézu zcela. Pokud si znovu připomeneme její znění:

1. Každé částici s danou hybností p je spjato vlnění o vlnové délce λ. Pokud má tedy nějaká částice nenulovou hybnost (hmotnost a rychlost), pak je současně vlnou s příslušnou vlnovou délkou.

2. Zároveň, pokud má vlna (nenulovou) vlnovou délku, pak je současně částicí s příslušející hybností.

Znění bylo záměrně rozděleno na dvě části a očíslováno. V našem případě jsme zatím pomocí rozboru fotoefektu zdůvodnili druhou část tvrzení (pro přehlednost zeleně). Měli jsme elektromagnetickou vlnu (světlo) o určité vlnové délce a přišli jsme na to, že k vysvětlení fotoefektu bylo nutné jí přisoudit částicový charakter. Odpovídající částici jsme nazvali fotonem a de Broglieho hypotéza nám říká, že se jí dá přiřadit hybnost.

Nejspíše by bylo vhodné zdůvodnit, proč pokud se díváme na foton jako na částici, musí mít hybnost. Při srážce fotonu a elektronu vázanému v atomu došlo k uvolnění elektronu z atomu, který tím získal nějakou rychlost. Tím, že elektron, který byl původně v klidu, získal rychlost, došlo určitě podle vztahu (1.1) ke změně jeho hybnosti. A v izolované soustavě těles platí, že hybnost se zachovává. Vzhledem k tomu, že náš izolovaný systém jsou pouze elektron a foton, tak jedinou možností, jak docílit změny hybnosti elektronu a neporušit zákon zachování hybnosti je, že foton musel mít určitou hybnost, kterou následně elektronu předal.

Další známý efekt, po jehož objasnění je nutné se na elektromagnetické záření dívat jako na proud fotonů (částic) je Comptonův jev. Tento jev zde nebude probírán a zájemce o jeho problematiku odkazujeme na [3].

Někdo by si mohl myslet, že pokud platí, bod (2) určitě platí i bod (1) To, však v obecném případě nemusí být pravda. Pokud se podíváme na problém více matematicky, zjistíme, že body (1) a (2) samy o sobě jsou vlastně implikace. Implikace vyjadřuje určitou logickou závislost: „pokud platí A, pak určitě platí B“. Takový výrok, ale automaticky neznamená, že když platí B, pak určitě platí A. Ukažme si jednoduchý důkaz sporem:

Výrok A: „Jsem kapr.“
Výrok B: „Jsem ryba.“

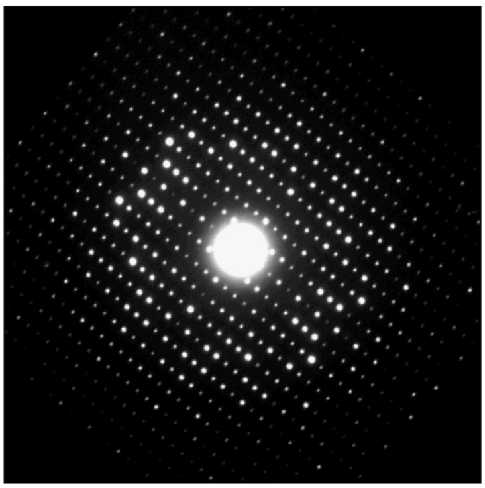
Implikace: „pokud platí A („Jsem kapr.“), pak platí B („Jsem ryba.“) je v pořádku, protože všichni kapři jsou ryby a jsem-li kapr, pak jsem určitě také ryba. Opačné tvrzení je ale nepravdivé: „Jestliže jsem ryba, pak jsem určitě kapr.“ protože informace, že jsem ryba, mi neumožňuje s určitostí říct, že jsem kapr, můžu být například sumec.

Z těchto matematických úvah vyplývá, že (vrátíme-li se k původnímu problému) bod (1) musíme zdůvodnit samostatně. Tím nám vznikne oboustranná implikace, kterou nazveme ekvivalencí. K tomu, abychom ukázali, že částice z hybností p má i vlnovou délku danou de Broglieho vztahem nám dobře poslouží elektron. Nyní si zkusme vysvětlit, na jakém jevu to budeme ukazovat. Vhodným jevem pro tuto demonstraci je difrakce na krystalu.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [1][3][4][7].

1.4 Difrakce elektronu

Krátce jen připomeňme z fyziky, co rozumíme pod pojmem **difrakce**. Difrakce neboli ohyb je jev podmíněný vlnovými vlastnostmi. Jejich důsledkem je odlišné šíření než by odpovídalo (přímočarému) šíření částic. Ohyb se projevuje tak, že po dopadu na okraj překážky dochází k šíření i za překážku, do oblasti geometrického stínu. Tzn. do prostoru, kam by na základě přímočarého šíření nemělo proniknout. Na obrázku si lze prohlédnout tzv. difrakční obrazec.



Obrázek 1.3: Difrakční obrazec

Poznamenejme, že z fyzikálních vlastností vln lze odvodit, že k pozorování difrakce je nutné, aby byly rozměry překážky, na nichž difrakce probíhá, srovnatelného rozměru s vlnovou délkou použitého záření (částic). Pojďme se tedy podívat na možné vlnové délky některých částic.

Pokud bychom například přemýšleli jaká je de Broglieho vlnová délka fotbalového míče pohybující ho se 10 m/s. uvažujme, že jeho hmotnost je asi 0,5 kg. Tato jeho hypotetická vlnová délka se dá spočítat pomocí de Broglieho hypotézy (1.6) a vztahu (1.1) jako.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \tag{1.15}$$

Po číselném dosazení dostáváme:

$$\lambda = \frac{6,626.10^{-34}}{10.0,5} = 1,3.10^{-34}\ \mathrm{m} \tag{1.16}$$

Chceme-li pozorovat difrakci, musí být velikost překážky s touto hodnotou srovnatelné. Uvažujme, že jádro atomu má velikost přibližně 10^{-15} m, pak je ale jasné, že neexistuje žádná použitelná překážka s rozměry 10^{-34} m a není tedy možné difrakci takto velkého objektu, jako je fotbalový míč pozorovat.

Znovu si připomeňme vzorec pro výpočet de Broglieho vlnové délky:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Naším cílem je zvětšit vlnovou délku na co největší číslo. Pokud totiž bude vlnová délka velké číslo, pak budeme moci použít větší překážku a difrakce bude lépe pozorovatelná. Pokud se podíváme na příslušný vzorec, tak je vidět, že vlnová délka závisí nepřímo úměrně na hmotnosti a rychlosti částice, která bude použita k difrakci. Z toho tedy vyplývá, že vlnová délka se dá zvětšit tedy dvěma způsoby:

1. zmenšením hmotnosti částice
2. zmenšením rychlosti částice

Čtenáře by nyní mohlo napadnout, že pokud dokáže zařídit, že rychlost částice bude velmi blízká k nule, pak se může její hmotnost zvětšovat třeba až k miligramům, nebo gramům (tedy k hmotnostem, které nejsou typické pro mikrosvět). V této fázi musíme čtenáře vyvést z omylu. Rychlost částice a její hmotnost jsou spolu provázané podle kinetické teorie. Jednoduše řečeno, má-li těleso nějakou teplotu rozdílnou od absolutní nuly (poznamenejme, že každé těleso musí mít teplotu rozdílnou od absolutní nuly – to plyne z třetího zákona termodynamiky), pak se částice v něm vlivem tepelného pohybu neustále a neuspořádaně pohybují. Tomuto jevu říkáme Brownův pohyb.

My vám tady na nejjednodušším možném systému, tedy na ideálním plynu, ukážeme, jak jsou spolu provázené hmotnost částice a rychlost jejího pohybu. Z mechaniky je známo, že kinetická energie (E jedné částice se spočte jako:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \tag{1.17}$$

kde v je rychlost částice a m je hmotnost částice. Z termodynamiky vyplývá, že kinetická energie ideálního plynu závisí pouze na teplotě a to konkrétně podle vztahu:

$$E = \frac{i}{2}kT \tag{1.18}$$

V tomto vzorci je k Boltzmanova konstanta s hodnotou $1{,}38.10^{-23}$ J/K, T termodynamická teplota a i je tzv. stupeň volnosti. V našem případě není nutné se touto veličinou zaobírat. Jen uvedeme, že pro jednoatomové plyny (př. helium) je $i = 3$ a pro dvouatomové molekuly molekuly (př. vodík, kyslík) je $i = 5$. Pokud to čtenáři pomůže, může si místo veličiny stupeň volnosti psát 3 nebo 5.

Jelikož oba předchozí vzorce jsou vzorci pro kinetickou energii a musí se sobě tedy rovnat. Z čehož plyne rovnost:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{i}{2}kT \tag{1.19}$$

Nyní se budeme snažit z rovnice vyjádřit rychlost částice. Budeme postupovat takto:

1. Rovnici vynásobíme dvěma.
2. Rovnici vydělíme hmotností (m).
3. Rovnici odmocníme.

Po těchto úpravách dostáváme:

$$v = \sqrt{\frac{ikT}{m}} \tag{1.20}$$

Pokud nyní rychlost dosadíme do 1.13, dostaneme:

$$\lambda = \frac{h}{m\sqrt{\frac{ikT}{m}}} = \frac{h}{\sqrt{\frac{m^2ikT}{m}}} = \frac{h}{\sqrt{ikmT}} \tag{1.21}$$

Pokud bychom nyní provedli přibližné zobecnění pro kapaliny, pevné látky a neideální plyny, bude ve jmenovateli spíše nějaká funkce teploty. Ideální plyn nám však postačí pro popis osamostatněné částice, což je případ, který budeme dál potřebovat.

$$\lambda \sim \frac{h}{\sqrt{kmf(T)}} \tag{1.22}$$

Z rovnice 1.21 vyplývá, že de Broglieho vlnová délka závisí na hmotnosti částice a termodynamické teplotě. Uveďme, že pokud bychom chtěli zvětšit vlnovou délku o několik řádů, museli bychom i teplotu snížit o několik řádů. Potom bychom se tedy dostávali k teplotám v blízkosti absolutní nuly. Tuto oblast fyziky studuje fyzika nízkých teplot a my se jí zde dále nebudeme zaobírat. Pouze prohlásíme, že změna teploty, tak blízko absolutní nuly by byla buďto nemožná, nebo extrémně náročná. Vraťme se nyní k fotbalovému míči, který měl vlnovou délku 10^{-34} m a my bychom ji chtěli zmenšit na rozměr atomu, tedy na 10^{-10} m. Museli bychom vlnovou délku zmenšit o 24 řádů. To z hlediska teploty není možné. Jen pro zajímavost uveďme, že nejnižší teplota vytvořená v laboratoři byla $4{,}5.10^{-10}$ K. Ta je od běžné teploty 300 K vzdálena pouze o 12 řádů.

Pokud budeme uvažovat, že teplotu bude uvažovat konstantní, tak vzorec 1,18 přejde na vztah:

$$\lambda \sim \frac{K}{\sqrt{m}} \tag{1.23}$$

kde K je nějaká obecná konstanta, která do sebe „schová“ všechny ostatní neměnné parametry a konstanty, v našem případě tedy Planckovu konstantu, termodynamickou teplotu a stupeň volnosti. Ze vzorce 1.22 vyplývá, že jediná možnost, jak se dá zvětšovat vlnová délka je zmenšováním hmotnosti.

Nyní se můžeme podívat, jaká by byla přibližně vlnová délka atomu helia v plynném stavu za běžné pokojové teploty. Pokojovou teplotu uvažujme 300 K (27°C). Hmotnost atomu helia je přibližně 6.10^{-27} kg. Dosadíme do vzorce 1.21.

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{ikmT}} = \frac{6,6.10^{-34}}{\sqrt{3.1,38.10^{-23}.6.10^{-27}.300}} = 8.10^{-11}\ \mathrm{m}$$

U tohoto výsledku je potřeba si uvědomit, že celková rychlost částice je složena ze dvou rychlostí:

1. Rychlost, která je částici dána díky tepelnému pohybu – díky této rychlosti se částice náhodně pohybuje všemi směry.

2. Rychlost, která je částici dána, vlivem vnější síly – díky této rychlosti se částice pohybuje konkrétním směrem (je schopna dostat k překážce, na níž má probíhat difrakce)

My jsme v našem případě uvažovali pouze rychlost danou tepelným pohybem. Pokud bychom uvažovali i rychlost potřebnou k posunu konkrétním směrem bude celková rychlost vyšší. Vzhledem k tomu, že se rychlost nachází při výpočtu vlnové délky ve jmenovateli, tak vyšší rychlost povede k menší vlnové délce. Tato skutečnost vyplývá ze vztahu (1.15).

Dále jen pro upřesnění uveďme, že výpočet je pouze přibližný, neboť vztah 1.21 je odvozen na základě klasické fyziky a pro přesnější výpočty by bylo potřeba využít kvantové termodynamiky. Toto tvrzení má pouze zdůvodnit nepřesnost výsledku a také to proč bylo ve výpočtu použito znaménko přibližně místo rovnosti. Vzhledem k tomu, že tento materiál se snaží ukázat, jak se přišlo na některé kvantové efekty a jejich nejjednodušší aplikace ve fyzice a chemii je kvantová termodynamika nad jeho rámec a dále nebude uvažována.

Nyní už je vidět, že vlnová délka je přibližně o jeden až dva řády menší než je rozměr atomu. Takže je potřeba použít něco ještě menšího než je atom. Je tedy jasné, že musíme použít elementární částice. Z těch nejznámějších přichází v potaz: proton, neutron a elektron. V následující tabulce jsou uvedeny jejich přibližné hmotnosti.

Tabulka 1.3: Hmotnost protonu, neutronu a elektronu

elementární částice	elektron	neutron	proton
hmotnost	$9,1.10^{-31}$ kg	$1,6.10^{-27}$ kg	$1,6.10^{-27}$ kg

Z těchto hodnot je jasné, že nejlepší elementární částice, kterou můžeme z dané nabídky využít je elektron. Výpočet zde budeme provádět pro elektron. Čtenář sám si může provést výpočet pro proton a měl by dojít k tomu, že vlnová délka protonu, nebude srovnatelná s velikostí atomu (konkrétně bude menší).

Uvažujme situaci, kdy provádíme difrakci elektronů. K tomu, abychom elektrony urychlili, použijeme napětí 100 V (tato rychlost je ideální k tomu, aby převládal uspořádaný pohyb způsobený polem nad chaotickým tepelným pohybem). Abychom tohle potvrdili, spočítáme rychlost elektronů při tepelném pohybu ze vztahu (1.21):

$$v \sim \sqrt{ikT/m} \sim \sqrt{\frac{3.1,38.10^{-23}.300}{9,1.10^{-31}}} = 1.10^5 \mathrm{m/s}$$

Nyní spočítáme rychlost, která je udělena elektronu pomocí elektrického pole. Uvažujme, že elektron je v době, kdy na něho nepůsobí elektrické pole v klidu. (nyní uvažujeme pouze translační rychlost a nikoliv tu, co mu je dána tepelným pohybem – ta určitě nulová není a byla vypočítána v bodě 1). Pokud tedy na elektron působí elektrické pole, tak práce elektrického pole je rovna změně kinetické energie elektronu. Elektrickou práci vyjádříme podle vztahu (1.9):

$$W = eU$$

Kinetickou energii vyjádříme podle vztahu (1.17), jako:

$$E = \frac{1}{2}mv^2$$

Pokud byl elektron na počátku v klidu, tak změna kinetické energie je rovna její hodnotě a práce je v tomto případě rovna kinetické energii, což můžeme zapsat vzorci:

$$W = E$$

Po dosazení za práci a kinetickou energii dostáváme:

$$\frac{1}{2}mv^2 = eU$$

Tuto rovnici budeme upravovat těmito kroky:

1. Vynásobíme rovnici dvěma
2. Vydělením rovnice hmotností (m)
3. Odmocněním rovnice

Po třetí kroku dostaneme tento výsledek:

$$v = \sqrt{\frac{2eU}{m}} = \sqrt{\frac{2.1,602.10^{-19}.100}{9,11.10^{-31}}} = 6.10^6 \text{ m/s}$$

Vidíme, že rychlost udělená elektrickým polem je přibližně o jeden řád vyšší než rychlost udělená neuspořádaným tepelným pohybem. Pro jednoduchost budeme uvažovat pouze rychlost způsobenou elektrickým polem (přesnější výsledek bychom dostali, kdybychom vektorově sečetli obě rychlosti – rychlost způsobující elektrické pole a rychlost

způsobující neuspořádaný pohyb). Rychlost, která nám vyšla dosadíme do vzorce pro de Broglieho vlnovou délku.

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,626.10^{-34}}{9,11.10^{-31}.6.10^{6}} = 1.10^{-10}\ \mathrm{m}$$

Vidíme, že výsledná vlnová délka, na které by mohla být difrakce pozorovatelná se shoduje se vzdáleností atomů. Na základě této teorie byl historicky proveden Davisson-Germerův experiment. Tento experiment dokazoval druhou implikaci v de Broglieho hypotéze: "Každé částici s danou hybností p je spjato vlnění o vlnové délce λ. Pokud má tedy nějaká částice nenulovou hybnost (hmotnost a rychlost), pak je současně vlnou s příslušející vlnovou délkou."

Princip experimentu spočíval v tom, že vlnová délka elektronu byla spočtena podle klasické teorie z optiky (na výpočet jejích hodnot se podíleli experimentální data) a dosazením do de Broglieho hypotézy. Výsledkem experimentu bylo, že obě dvě hodnoty vlnové délky vycházeli stejně. Tento experiment potvrdil de Broglieho hypotézu. Pokud totiž vypočtená hodnota vlnové délky z její hybnosti byla stejná jako hodnota, která vyšla z experimentálních dat bylo, proto jediné zdůvodnění a to, že pokud má částice hybnost p, pak jí příslušný daná vlnová délka λ.

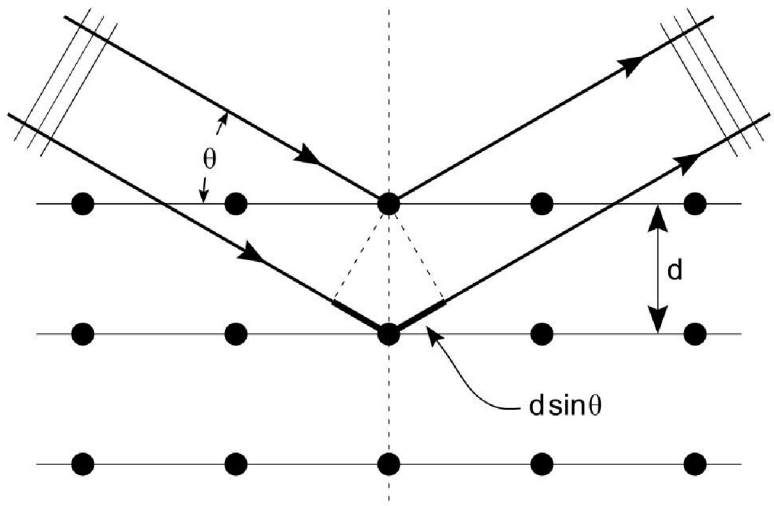
My vám v této kapitole ještě ukážeme uspořádání Davisson-Germerova experimentu. Tento experiment proběhl v roce 1927. Stal se tedy potvrzení nejen de Broglieho hypotézy (1924), ale také potvrzením Schrödingerovy rovnice (1926). Schrödingerova rovnice je základní rovnicí celé kvantové mechaniky a v dalších kapitolách s ní ještě budete pracovat a dozvíte se o ní více. Pro úplnost jen uveďme, že matematicky jsme schopni z de Broglieho hypotézy odvodit právě Schrödingerovu rovnici, a proto je potvrzení de Broglieho hypotézy současně potvrzení Schrödingerovy rovnice. Nyní už přejděme k vlastnímu uspořádání Davisson-Germerova experimentu.

Jednalo se o difrakci elektronů na atomech niklu. Uspořádání vidíte na následujícím obrázku.
Vlnová délka pomocí de Broglieho hypotézy se provádí způsobem jaký jsem předvedli v předchozích odstavcích. Vlnová délka difrakce z klasické optiky se počítá tímto vztahem, tzv. Braggovou rovnicí.

$$\lambda = \frac{2d\sin\theta}{k} \tag{1.24}$$

kde příslušné veličiny vysvětluje obrázek 1.4. Jedná se o vzorec, který popisuje difrakční maxima na mřížce krystalu. V případě Davisson-Germerova experimentu vytvářejí mřížku atomy niklu a mřížkový parametr je vzdálenosti atomů niklu, která byla vypočtena z vlastností krystalických látek (hustota kovu, geometrie krystalu atd.). Čtenářům v tomto okamžiku bude stačit vědět, že v roce 1927 byla hodnota mřížkové konstanty pro atomy dobře známa.

V našem konkrétním experimentu máme vlnovou délku elektronu danou (vstupním napětím) a snažíme se jí potvrdit experimentálním výpočtem. Mřížkový parametr je také daný. Jediné, co jsme schopni měnit je úhel pod, kterým budeme proti atomům niklu



Obrázek 1.4: Schéma vysvětlující veličiny v Braggově rovnici

vystřelovat elektrony. Úhel v našem případě je svírán mezi směrem výstřelu elektronů proti mřížce a mřížkou (atomy niklu). Pro lepší ilustraci dáváme následující obrázek.

V experimentu se tedy měnil úhel pod, kterým byly vystřelovány elektrony až do chvíle než se ukázala maxima interference. Tento úhel byl dosazen do následujícího vzorce a porovnán s hodnotou zjištěnou z výpočtu z de Broglieho hypotézy.

Proveďme na tomto místě konkrétní výpočet. Vzdálenost mezi atomy v mřížce niklu je a = 3,5.10^{-10} m. Pro 65 V byl naměřen úhel 25° pro maximální difrakční řád $k = 1$. Dosaďme tyto hodnoty do příslušných vztahů.

$$\lambda = \frac{2a\sin\theta}{k} = 2.3,5.10^{-10}\sin 25^\circ = 3.10^{-10}m$$

Proveďme výpočet de Broglieho vlnové délky:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

kde za rychlost dosadíme ze vztahu:

$$v = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$$

Vlnová délka se tedy spočítá jako:

$$\lambda = \frac{h}{m\sqrt{\frac{2eU}{m}}} = \frac{6,626.10^{-34}}{9,11.10^{-31}.3.10^{6}} = 1.10^{-10}\text{ m}$$

Pokud porovnáme oba dva výsledky vlnových délek zjistíme, že jsou stejné. Pokud by se experiment opakoval i pro jiné hodnoty napětí a úhlu, tak by opět vlnové délky byly

stejné. (Ve skutečnosti by byl výpočet podle Braggovy rovnice složitější, my jsme totiž předpokládali dopad na přirozenou rovinu krystalu.) Tento experiment tedy definitivně potvrdil de Broglieho hypotézu:

1. Každé částici s danou hybností p je spjato vlnění o vlnové délce λ. Pokud má tedy nějaká částice nenulovou hybnost (hmotnost a rychlost), pak je současně vlnou s příslušející vlnovou délkou.

2. Zároveň, pokud má vlna (nenulovou) vlnovou délku, pak je současně částicí s příslušející hybností.

Vztah mezi těmito vlnovými délkami a hybnostmi zachycuje následující rovnice:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Tato podkapitola byla inspirována texty: [1][2][3][4][5][6][7][8][9]

1.5 Matematický popis vln

V poslední části této kapitoly vám ještě ukážeme matematický popis vln, a to z toho důvodu, že jak se ukázalo v této kapitole dají se částice v mikrosvětě popisovat jako vlny. Matematicky lze rovnici postupného vlnění zapsat jako:

$$y = y_m \sin\left(\omega t + \frac{2\pi}{\lambda}x\right) \quad \text{nebo} \quad y = y_m \sin\left(\omega t + \frac{2\pi}{\lambda}x\right) \tag{1.25}$$

Tento zápis je nejčastěji používán na střední škole, jako zápis pro vlnu. Nyní je na čase se zopakovat význam jednotlivých veličin. Veličiny vyskytující se v této rovnici lze rozdělit do dvou skupin:

1.skupina – čas (t), prostorová souřadnice (x), jsou to neznámé, za které dosazujeme. Jednoduše řečeno v jakém čase a na jakém místě nás bude vlna zajímat.

2. skupina – amplituda vlny (y_m), vlnová délka (λ), úhlová frekvence (ω).

Pokud využijeme definiční vztah pro vlnový vektor, resp. jeho velikost, tak vlnová rovnice přejde na tvar:

$$y = y_m \sin(\omega t + kx) \quad \text{nebo} \quad y = y_m \sin(\omega t + kx) \tag{1.26}$$

Dále jen poznamenejme, že vysokoškolské učebnice používají místo funkcí sinus a kosinus komplexní exponenciály. Význam rovnice zůstává stejný pouze je usnadněno matematické operování s takovými rovnicemi. Vzhledem k tomu, že komplexní čísla jsou nad rámec středoškolské výuky držíme se zde známých funkcí sinus a kosinus.

V tomto tvaru, jak jsme to popisovali doposud se jedná o popis standardní mechanické vlny (např. zvuku). Pokud budeme chtít touto rovnicí popsat částici v mikrosvětě (která je vlastně de Broglieho vlnou), tak do této rovnice musíme ještě dosadit dva vztahy z této

kapitoly. Jsou to vztah pro energii jednoho fotonu, o kterém jsme mluvili u fotoelektrického jevu a vztah vyjadřující de Broglieho hypotézu.

Ze vztahu pro energii vyjádříme frekvenci a dostáváme.

$$f = \frac{E}{h}$$

Nyní využijeme „středoškolského“ vzorce pro popis vlny a za frekvenci a vlnovou délku dosadíme. Přičemž dostáváme:

$$y = y_m \sin\left(\frac{2\pi E}{h}t + \frac{2\pi p}{h}x\right) \tag{1.27}$$

V této rovnici uvnitř argumentu funkce sinus vytkneme plancovu konstantu h. Dostáváme tedy:

$$y = y_m \sin\left[\frac{2\pi}{h}(Et + px)\right] \tag{1.28}$$

Pro podíl Planckovi konstanty a 2π zavádíme označení redukovaná Planckova konstanta, kterou značíme $\hbar$.

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \tag{1.29}$$

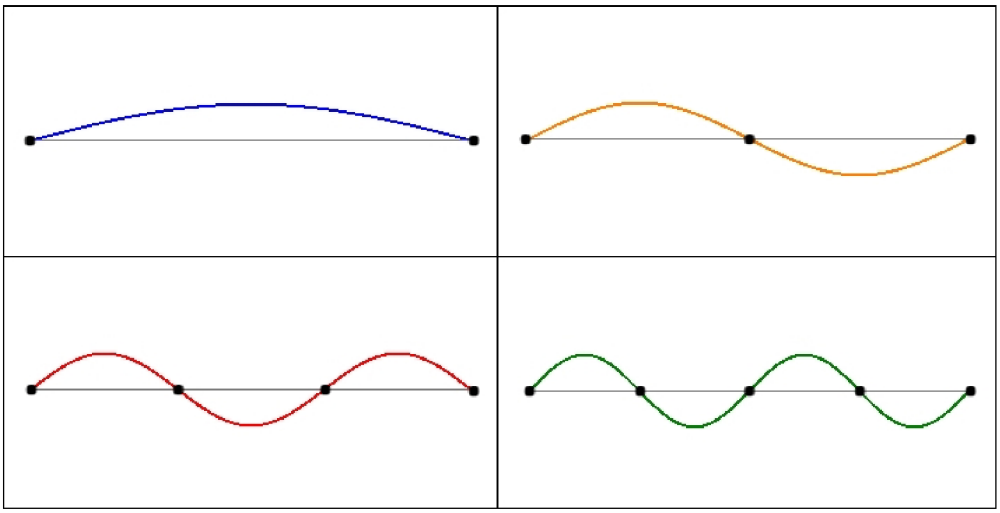
Této symboliky se často využívá ve kvantové mechanice ve vyšších stupních vzdělávání. Po přeznačení již dostáváme výraz, který popisuje de Broglieho vlnu:

$$y = y_m \sin\left[\frac{1}{\hbar}(Et + px)\right] \tag{1.30}$$

Částice v mikrosvětě lze popsat postupnou vlnou, pokud není nijak omezena. Není k ní vloženo žádné pole, které by ji mohlo ovlivňovat. Opět se jedná o paralelu k vlnění, které není nijak omezeno svým okolím a může se volně šířit.

Pokud je ale částice omezena (např. v nekonečně hluboké potenciálové jámě) už se začne chovat jako tzv. stojatá vlna. O nekonečně hluboké potenciálové jámě se toho více dozvíte v následující kapitole. Právě na tomto systému Vám budeme poprvé ukazovat podivnosti kvantové mechaniky. Nyní už zpět ke stojatým vlnám, které také znáte z klasického studia mechaniky vlnění. Představme si např. strunu, která v našem případě bude představovat mechanické prostředí, kterým se může vlnění šířit. Struna je na svých koncích pevně uchycena. Tudíž vlnění, které uvnitř struny vznikne je omezeno svým okolím a bude se zásadně lišit od postupného vlnění popisovaného předchozí rovnicí.

Nyní si stojaté vlnění popíšeme. K tomuto popisu budeme užívat následujících obrázků:



Obrázek 1.5: Struny s různými počty uzlů

Na prvním obrázku je struna, která je pevně uchycena pouze na svých koncích. I když u kytary je typické strunu uchytit pouze na koncích, tak můžeme toto pravidlo porušit a uchytit naši strunu i uprostřed. Obrázky výše ukazují různé počty uchycení strun uprostřed (0 uchycení uprostřed, 1 uchycení uprostřed, 2 uchycení uprostřed, 3 uchycení uprostřed). Z těchto úvah by mělo být jasné, že takových možností jsme schopni najít nekonečně moc a lišili by se právě množstvím uchycení uprostřed.

Zaveďme si nyní veličinu, která bude popisovat kolik nalezneme uchycení struny uprostřed. Tuto veličiny označme n. Pokud bude $n = 1$ jedná se o uchycení pouze na koncích (1. obrázek) a mluvíme v mechanice vlnění o tzv. základní frekvenci. Pokud bude $n = 2$ jedná se o 1 uchycení uprostřed (2. obrázek) Pokud bude $n = 3$ jedná se o 2 uchycení uprostřed (3. obrázek). Pokud bude $n = 4$ jedná se o 3 uchycení uprostřed (4. obrázek).

Pro kvantovou mechaniku má největší význam nalezení souvislosti mezi vlnovou délkou a délkou struny. Využití tohoto popisu uvidíte v následující kapitole. Označme si délku struny l a vlnovou délku vlny λ.

Opět si prohlédněte obrázky vln. Nyní se pokusíme zamyslet, jak spolu souvisí vlnová délka a délka struny prvním obrázku. Z obrázku by mělo být jasné, že na jednu délku struny l připadá půlka vlnové délky. K tomu totiž, aby se tam vešla celá vlnová délka bylo by potřeba, aby vzdálenost byla $2l$. To lze matematicky zapsat:

$$\lambda_1 = 2L$$

Na druhém obrázku po provedení stejné úvahy zjišťujeme, že vlnová délka je stejná jako délka struny. To můžeme matematicky zapsat jako:

$$\lambda_2 = L$$

Na třetí obrázku zjišťujeme, že 3/2 vlnové délky jsou rovny délce struny píšeme jako:

$$\lambda_3 = \frac{2}{3}L$$

Na čtvrtém zjišťujeme, že 2 vlnové délky jsou rovny délce struny píšeme jako:

$$\lambda_3 = \frac{1}{2}L$$

Všechny čtyři výsledky si vypišme přehledně pod sebe. U druhého a čtvrtého výsledku provedeme rozšíření ve zlomku a dostáváme.

$$\lambda_1 = \frac{2}{1}L$$
$$\lambda_2 = \frac{2}{2}L$$
$$\lambda_3 = \frac{2}{3}L$$
$$\lambda_4 = \frac{2}{4}L$$

Nyní už je vidět, že čísla obrázků odpovídají námi zavedené veličině n a obecně lze předchozí vzorcem obecně napsat pomocí veličiny n jako:

$$\lambda_n = \frac{2}{n}L \tag{1.31}$$

Tato rovnice je velmi důležitá a bude se nám v následující kapitole hodit. Doporučujeme její zapamatování. Nyní již můžeme stojatou vlnu popsat matematickou rovnicí. Tu sestavíme tak, že popíšeme maximální výchylku v každém bodě na struně:

$$y = y_m \sin\left(\frac{2\pi n}{2L}x\right) = y_m \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \tag{1.32}$$

Toto je matematický popis stojaté vlny.

Na závěr ještě uvádíme přehlednou tabulku stojaté a postupné vlny.

Tabulka 1.4: Přehled stojatých a postupných vln

	klasická mechanika (vlnění)	kvantová mechanika (částice)
postupná vlna	např. vlny na vodní hladině	volná částice (bez interakce s okolím)
stojatá vlna	např. struna kytary	částice omezená bariérou (interakce částice s okolím je omezená)

Tato podkapitola byla inspirována texty: [1][2][3][4][5][10][11][12].

Kapitola 2

Nekonečně hluboká potenciálová jáma

Nejprve začneme úplně tím nejjednodušším případem, jaký je možný v případě kvantové mechaniky řešit a tím je nekonečně hluboká pravoúhlá potenciálová jáma. V tomto učebním textu budeme tento problém řešit dvěma způsoby a v obou případech obdržíme stejný výsledek. První způsob je ten, že nejprve si definujeme Schrödingerovu rovnici pomocí níž, pak dopočítáme všechny relevantní informace. Druhý způsob je ten, že částici si představíme jako stojatou vlnu ohraničenou okraji jámy. Dále uděláme paralelu mezi pohybem částice, jako mikroobjektu a stojaté vlny a z toho usoudíme všechny relevantní informace.

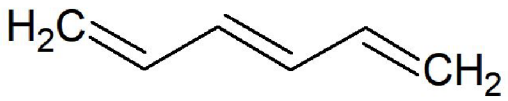
Na počátku je vhodné si říct, proč jsme si jako první systém, který bude v kvantové mechanice řešit vybrali právě nekonečně hlubokou potenciálovou jámu. Nejvýznamnější důvod je právě ten, že nekonečně hluboká potenciálová jáma je na matematické řešení pomocí kvantové mechaniky nejjednodušší. Je to dokonce jediný systém, který se dá se základními znalostmi ze střední školy vyřešit kompletně bez nějaký zkratek, nebo konstatování výsledku. Navíc se dá systém nekonečně hluboké potenciálové jámy porovnat se stojatou vlnou a výsledek se dá bez složitého řešení uhodnout.

Nekonečně hluboká potenciálová jáma ovšem není jen vymyšleným systémem k jednoduchému řešení. Má spoustu aplikací, ve kterých model nekonečně hluboké jámy dává výsledky velmi blízké experimentu. Obecně nám často pro konkrétní fyzikální a chemické systémy stačí znát pouze přibližný výsledek, a proto je právě model nekonečně hluboké potenciálové jámy používán. Výsledky kvantové teorie jako výpočtu se porovnávají s experimentálně zjištěnými daty a opakovaně se tím potvrzuji správnost kvantové teorie. Schopnost ověřit danou teorii experimentem je jedna z podmínek, která je nutná pro každou úspěšnou vědeckou teorii.

Aplikace se kterými se prostřednictvím této práce seznámíte jsou:

- Libovolný translační (posuvný) pohyb molekul,
- Elektronový plyn, což je abstrakce kterou tvoří elektrony v kovech.
- Systém konjugovaných pí vazeb v lineární (konjugované) molekule
- Kvantové tečky, což je oblast polovodiče o velikosti několika desítek nanometrů, která je díky své nižší energii schopná vázat elektrony.

Nejprve si něco málo povíme o elektronovém plynu. Jedná se o systém, který popisuje elektrony nacházející se v kovech. Představujeme si to, tak že je to krystal, který obsahuje N atomů a každý z těchto atomů přispívá vodivostními elektrony. Tyto volné elektron jsou ovlivňovány krystalem a chovají se jako by byly v potenciálové jámě. Další aplikací, kterou si přiblížíme je systém konjugovaných pí vazeb. Jako konkrétní případ si vybereme molekulu hexatrienu. Tuto molekulu je možné vidět na následujícím obrázku.



Obrázek 2.1: Struktura hexatrienu

Šest elektronů je v tomto případě vázáno rozměrem molekuly. To lze s velmi dobrou přesností přiblížit právě potenciálové jámě. Experimentálně budeme tento model ověřovat pomocí vlnové délky vyzařovaného záření. Matematický model pomocí nekonečně hluboké potenciálové jámy předpovídá vlnovou délku 250 nm. Zatímco experimentálně zjištěná hodnota je 258 nm. Vidíme tedy, že tento model je poměrně dost přesný.

Poslední aplikací, kterou Vám zde ukážeme jsou kvantové tečky. Kvantová tečka je ohraničená oblast polovodiče, ve které je uzavřený elektron. Tato oblast mívá rozměry o několika desítek nanometrů a bývá vysoká v jednotkách nanometrů. Energie uvnitř oblasti polovodiče je nižší než energie ve vodivostním pásu polovodiče a z toho tedy plyne, že je oblast uvnitř polovodiče pro elektrony preferovaná. Jelikož jsou elektrony vázané uvnitř oblasti s velmi malou šířkou projeví se zde kvantové vlastnosti hmoty a to se uplatní při tvorbě specifických elektronických součástech. Jako příklady takových součástek uvádíme tranzistor a LED diodu.

Tato část byla inspirována texty: [4][12][13].

2.1 Schrödingerova rovnice

Nejprve začneme nekonečně hlubokou potenciálovou jámu řešit, tak že budeme hledat řešení Schrödingerovy rovnice. Nejprve je nutné napsat tvar této rovnice:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+E_p(x)\right]\Psi(x)=E\Psi(x) \tag{2.1}$$

Důležitou informací je to, že se jedná o Schrödingerovu rovnici ve stacionárním případě pro pohyb v jednom směru. Stacionárním případem rozumím to, že Schrödingerova rovnice je časově nezávislá. Nyní už si pojďme vysvětlit významy jednotlivých členů, která rovnice obsahuje:

- $\hbar$ je redukovaná Planckova konstanta
- m je hmotnost částice

- E je energie částice
- $E_p(x)$ je potenciální energie závislá na poloze, ve které se částice nachází
- Ψ je vlnová funkce
- $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ je výraz, který značí druhou derivaci podle polohy

Studenty, kteří neznají derivace a integrály odkazujeme na následující odstavec, kde se jím pokusíme vysvětlit jejich názornou představu nutnou pro pochopení tohoto členu.

Derivace popisuje, jak rychle daná funkce v daném bodě roste. Ukažme si jednoduchý příklad z mechaniky. Pokud bychom měli definovat, co je to velikost rychlosti napsali bychom, že to je změna dráha za určitý čas

$$\vec{v} = \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta t}$$

Pokud bychom chtěli zjistit velikost okamžité rychlosti, pak by nás zajímala nekonečně malá změna dráhy za nekonečně malý čas. Potom bychom tedy toto místo spojení nekonečně malá změna použili výraz derivace. Zápis by vypadal následovně:

$$\vec{v} = \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t}$$

Těmito úvahami jsme představili čtenářům výraz derivace. Dále jen uveďme, že i druhá derivace se v mechanice používá velmi často a fyzikální definice velikosti zrychlení je druhá derivace polohy podle času. I tento vztah se dá snadno vysvětlit, pokud si uvědomíme, že zrychlení popisuje, jak hodně se za daný časový úsek zvýší rychlost. Matematicky zapisujeme takto:

$$\vec{a} = \frac{\Delta \vec{v}}{\Delta t}$$

Pokud bychom opět místo změny použili derivace, tak bychom dostali:

$$\vec{a} = \frac{\mathrm{d}\vec{v}}{\mathrm{d}t}$$

Po dosazení za rychlost derivaci podle času by nám vznikla již dříve zmíněná druhá derivace podle času.

$$\vec{a} = \frac{\mathrm{d}^2\vec{r}}{\mathrm{d}t}$$

Tato podkapitola byla inspirována texty: [4][5][7][10][11][12][14].

2.2 Vlnová funkce, stav

Nyní se vraťme ke Schrödingerově rovnici. U Ψ jsme napsali, že se jedná o vlnovou funkci, ale neuvedli jsme, co vlnová funkce je. Pokud bychom ji měli definovat, tak řekneme, že **vlnová funkce** popisuje stav systému/dané mikročástice. Nyní se ještě nabízí otázka, co je to ten stav. Opět uveďme definici a řekněme, že *stav systému je nejmenší možná informace, kterou musíme mít o systému, abychom aparátem dané disciplíny dokázali získat všechny potřebné informace*. Víme, že pro čtenáře se pojem stavu může zdát velmi abstraktní, proto Vám ho vysvětlíme na konkrétním příkladu z mechaniky. Pro úplnost jen uveďme, že pojem stav není nikterak specifický pro kvantovou fyziku a objevuje se ve všech ostatních fyzikálních disciplínách.

Uvažujme vodorovný vrh hmotného bodu bez odporu prostředí. Pro představu si za tímto popisem si představme, že házíme kámen v prostředí, kde je bezvětří (odpor vzduchu lze zanedbat). Hmotný bod chápeme, tak že nás nezajímá otáčení kamene a jeho následná deformace, ale pouze jeho poloha, rychlost a zrychlený hmotného středu. Jaké informace nás budou o tomto kameni zajímat. No obecně by mohlo být zajímavé, jak se mění rychlost v čase (jestli kámen zrychluje, zpomaluje a případně v jakém směru), a změna polohy v čase. Tyto věci, které nás zajímají můžeme matematický formulovat: a(t), v(t), r(t). Jedná se pouze o matematický zápis skutečnosti, že hledáme zrychlení, rychlost a polohu v závislosti na čase. Naším řešení bude tedy to, až získáme výsledek, kde se bude zrychlení, rychlost a poloha rovnat nějakému výrazu, který bude závislý pouze na času a známých parametrech. Nyní je potřeba se zamyslet, jaké informace musíme vědět, abychom byly schopni nalézt řešení. Základní rovnicí mechaniky je druhý Newtonův zákon, který má pro neproměnlivou hmotnost tvar:

$$\vec{F} = m\vec{a} \tag{2.2}$$

kde F je výslednic sil, která působí na těleso. m je hmotnost tělesa, a je zrychlení tělesa. Pro úplnost pouze uveďme, že obecně má druhý Newtonův zákon matematický zápis:

$$\vec{F} = \frac{\mathrm{d}\vec{p}}{\mathrm{d}t} \tag{2.3}$$

Z tohoto výrazu je vidět vidět, že základní rovnice mechaniky (2. Newtonův zákon) taky obsahuje derivaci. Z toho tedy vyplývá, že přítomnost derivace není ve fyzikálních zákon něčím neobvyklím. Naopak bychom mohli tvrdit, že téměř každý fyzikální zákon v sobě nějakým způsobem derivaci skrývá.

Na tomto místě si ještě ukažme, jak může obecný vztah pro 2. Newtonův zákon přejít v jeho speciální případ, který je často používán na střední škole a platí pouze pro konstantní hmotnost, pokud bychom za hybnost dosadili rovnici (1.1) dostali bychom:

$$\vec{F} = \frac{\mathrm{d}(m\vec{v})}{\mathrm{d}t}$$

Pokud si uvědomíme, že za podmínky konstantní hmotnosti, můžeme hmotnost přesunout před derivaci a získáme:

$$\vec{F} = m\frac{\mathrm{d}\vec{v}}{\mathrm{d}t}$$

Pokud si uvědomíme, že zrychlení je derivace rychlosti podle času získáme nám známý 2. Newtonův zákon. V našem případě se hmotnost kamene nemění, takže můžeme použít vztah:

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

Vidíme, že pokud chceme získat zrychlení musíme znát hmotnost a výslednici sil. V našem případě s kamenem na něho působí pouze jedna síla a to síla tíhová stačí znát velikost tíhové síly a hmotnosti. V tomto případě už jsme schopni zjistit zrychlení v obecném časovém okamžiku. Jak je vidět z předchozího vztahu zrychlení je časově nezávislé a zůstává tedy konstantní. Pokud si uvědomíme, že tíhová síla se dá spočítat jako:

$$\vec{F} = m\vec{g}$$

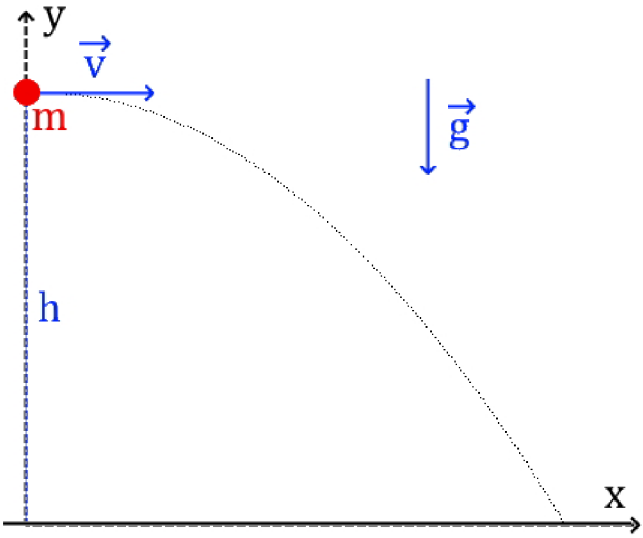
Tak zrychlení je rovno:

$$\vec{a} = \vec{g}$$

Nyní je potřeba abychom našli závislost $\vec{v}(t)$, $r(t)$. Jelikož se jedná o pohyb ve dvou složkách napíšeme vektor v a vektor r ve složkách jako:

$$\begin{aligned} \vec{r} &= (x, y, 0) \\ \vec{v} &= (v_x, v_y, 0) \\ \vec{a} &= (0, g, 0) \end{aligned}$$

Soustava souřadnic se vždy dá zvolit, tak aby pohyb probíhal pouze ve dvou složkách a to ve směru působící síly a ve směru počáteční rychlosti tělesa. Tato skutečnost a příslušné veličiny jsou předvedeny na následujícím obrázku.



Obrázek 2.2: Vodorovný vrh

Dále zapište definiční vztahy pro jednotlivé složky zrychlení:

$$a_x = \frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t} = 0$$
$$a_y = \frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t} = g$$
$$a_z = 0$$

Dále si musíme, že uvědomit, že opačná operace k derivování je integrování.

Pro představu vysvětleme opačné operace na něčem, co už z matematiky známe a to na umocňování a odmocňování. Mocnina a odmocnina jsou si taky vzájemně opačné operace.

Operace mocnina: $4 \rightarrow 16$

Operace odmocnina: $16 \rightarrow 4$

Vidíme, že pokud se tedy ptáme na otázku, jaké číslo musím odmocnit, aby mě vyšla 4, tak vím, že to je číslo 16.

Pokud zrychlení je derivace rychlosti podle času, tak rychlost zjistíme jako integraci rychlosti podle dt. Zapisujeme takto:

$$v_x = \int a_x \mathrm{d}t = \int 0 \mathrm{d}t$$
$$v_y = \int a_y \mathrm{d}t = \int -g \mathrm{d}t$$

Pokud si uvědomíme, že g není funkcí času můžeme ho přesunout před integrál a dostáváme:

$$v_y = -g \int \mathrm{d}t$$

Po řešení integrálu nám vyjde. Nesmíme zapomenou na integrační konstanty C, D.

$$v_x = \int 0 \mathrm{d}t = C$$
$$v_y = -g \int \mathrm{d}t = -gx + D$$

Konstanty C, D určíme z počátečních podmínek. Konkrétně z počáteční rychlosti. V okamžiku $t = 0$ s je $v_x = v_o$ a $v_y = 0$. Po dosazení $t = 0$ a $v(0) = 0$ dostáváme:

$$v_x = v_0$$
$$v_y = -gt$$

U zjišťování polohy se postup opět opakuje. Vyjdeme z definice jednotlivých složek rychlosti:

$$v_x = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$$
$$v_y = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}$$

z opačných operací opět vyplývá:

$$x = \int v_x \mathrm{d}t = \int v_0 \mathrm{d}t = v_0 t + K$$
$$y = \int v_y \mathrm{d}t = \int (-gt) \mathrm{d}t = -\frac{1}{2} g t^2 + L$$

Po dosazení počátečních podmínek dostáváme:

$$x = v_0 t$$
$$y = -\frac{1}{2} g t^2 + h$$

Počáteční polohu si můžeme zvolit libovolně. Volíme pro zjednodušení $x(0) = 0$, $y(0) = h$.

Tyto výsledky jsou všechny relevantní výsledky, které jsme schopni získat, pokud řešíme pohyb hmotného bodu v homogenním tíhovém poli bez odporu prostředí. Zbývá

si tedy položit, jaké musíme mít informace, abychom všechny tyto relevantní informaci získali.

Pokud si důkladně projdete výpočet zjistíte, že potřebujete znát velikost tíhové síly a hmotnost. Místo těchto dvou informací se dá zadat i pouze jen tíhové. K těmto dvěma informacím, který vstupují do základní rovnice (2. Newtonův zákona) zrychlení je potřeba zadat ještě počáteční podmínky polohy a rychlosti.

Je tedy vidět, že stav kamene při vodorovném vrhu je zadanými 3 údaji: zrychlením a počáteční rychlostí a počáteční polohou.

Tato celá úvaha byla provedena, proto aby si čtenář uvědomil, jaký význam má stav v klasické mechanice. Znova čtenáři opakujeme, že význam stavu je v kvantové fyzice určen vlnovou funkcí, která vyjde řešením Schrödingerovy rovnice.

Vše si ještě jednou přehledně zobrazme na následující tabulce:

Tabulka 2.1: Charakteristické veličiny

	klasická mechanika	kvantová mechanika
	vodorovný vrh hmotného bodu v homogenním tíhovém poli bez odporu prostředí	nekonečně hluboká pravoúhlá potenciálová jáma
stav	poloha a rychlost (řešení 2. Newtonova zákona) + tíhové zrychlení	vlnová funkce (řešení Schrödingerovy rovnice) + průběh potenciální energie
počáteční podmínky	počáteční rychlost a počáteční poloha	vlnová funkce v čase $t = 0$, nebo jiném významném čase
relevantní informace zjistitelné ze stavu v dané disciplíně	hybnost	hustota pravděpodobnosti, pravděpodobnost nalezení částice na konkrétním místě

Tato podkapitola byla inspirována texty: [3][5][14][15].

2.3 Vlastnosti vlnové funkce

Dva pojmy z tabulky a to konkrétně hustota pravděpodobnosti a pravděpodobnost bude vysvětlena u normování. Nyní, když už víme, že vlnová funkce představuje stav systému a máme představu, co pod pojmem stav nachází si musíme ještě něco říct o tom jaké podmínky jsou na vlnovou funkci kladeny. Vlnová funkce musí být:

1. Jednoznačná – souvisí s tím, že vlnová funkce popisuje stav a stav nemůže být určen nejednoznačně (měl by více možných interpretací)

2. Konečná – úzce souvisí z normováním bude vysvětleno později, jakmile bude potřeba tuto vlastnost využít při řešení příkladu.

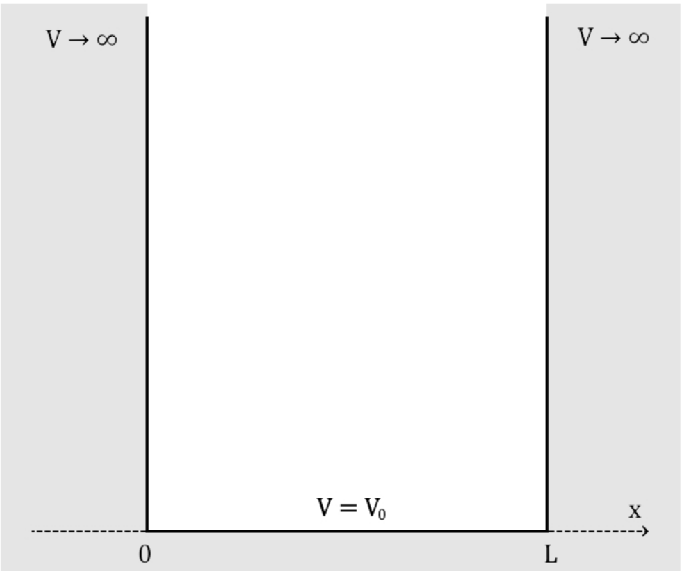
3. Kvadraticky integrabilní – musí se dát spočítat integrál z druhé mocniny vlnové funkce)

4. Spojitá – Spojitost vlnové funkce a obecné funkce v matematice je v tomto případě totožný. Pro studenty, kteří nebrali spojitost funkcí uvádíme jednoduchou představu, že nesmí být „přetržená. Musíme být schopni ji nakreslit jedním tahem)

Tato podkapitola byla inspirována texty: [7][10][11][12].

2.4 Řešení Schrödingerovy rovnice pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu

Nyní se už můžeme vrátit k řešení Schrödingerovy rovnice:



Obrázek 2.3: Nekonečně hluboká jáma a zvolené souřadnice

Uvažujme částici zavřenou do nekonečně hluboké potenciálové jámy. Na obrázku je soustava souřadnic zvolena tak, že levému rohu jámy odpovídá souřadnice x = 0 Délka potenciálové jámy je L. Z toho vyplývá, že pravý rok má souřadnici x = L. V místech od mínus nekonečna do nuly a od L do plus nekonečna je potenciál nekonečně velký. (Ve skutečnosti nemůže být nekonečně velký, ale může se jednat o velmi velké číslo oproti energie částice a hodnota vypočtená s nekonečným potenciálem se může té skutečné velmi blížit. Nekonečně hluboká potenciálová jáma byla zvolena, protože se jedná o nejjednodušší systém, který se dá v kvantové mechanice řešit, a přesto má své aplikace)

Z nekonečně velkého potenciálu vyplývá, že částice se nemůže nacházet mimo jámu. V této chvíli je dobré opět připomenout veličiny vystupující ve Schrödingerově rovnici:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+E_p(x)\right]\Psi = E\Psi$$

- $\hbar$ je redukovaná Planckova konstanta
- m je hmotnost částice
- E je energie částice
- $E_p(x)$ je potenciální energie závislá na poloze, ve které se částice nachází
- Ψ je vlnová funkce
- $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ je výraz, který značí druhou derivaci podle polohy

Nejprve určíme jaká je potenciální energie uvnitř jámy. Už v klasické mechanice můžeme k potenciální energii přičítat libovolnou konstantu a to tak, že volíme nulovou hladinu potenciální energie. Jako příklad nám poslouží stůl, na kterém leží kniha. Pokud zvolíme nulovou hladinu potenciální energie na zemi, potom bude potenciální energie knihy daná vztahem:

$$Ep = mgh$$

kde m je hmotnost knihy, g je tíhové zrychlení a h je výška tělesa od nulové hladiny počáteční energie (v našem případě je výška h výška stolu)

Pokud bychom zvolili nulovou hladinu potenciální energie na stole, pak by vzdálenost hladiny potenciální energie a knihy byla nulová a z výše uvedeného vzorce by byla i potenciální energie rovna nule. Matematicky plyne volba hladiny potenciální energie z toho, že potenciální energie se obecně spočítá jako:

$$E_p = -\int \vec{F}\mathrm{d}\vec{r} \tag{2.4}$$

V tomto vztahu vystupuje neurčitý integrál a k jeho řešení je tedy možné přičíst libovolnou konstantu C, která nám umožní volit nulovou hladinu potenciální energie. I u kvantových systému je možné volit nulovou hladinu potenciální energie libovolně. Pro jednoduchost zvolme hladinu potenciální energie uvnitř jámy jako $E_p = 0$. Potom přechází naše Schrödingerova rovnice uvnitř jámy na rovnici:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\Psi = E\Psi$$

Pokud přehodíme konstanty před derivací na pravou stranu dostáváme:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\Psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi$$

Dále zaveďme substituci, kde: $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$(jedná se pouze o jiný typ značení pro přehlednost).

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\Psi = -k^2\Psi$$

Toto je diferenciální rovnice druhého řádu.

Pokud bychom měli porovnat diferenciální a běžnou algebraickou rovnici, pak bychom řekli, že algebraická rovnice obsahuje neznáme proměnné a jejím řešením je, že neznámá se rovná nějakému číslu. Diferenciální rovnice obsahuje také neznáme, ale ještě navíc obsahuje i jejich derivace. Řešením diferenciální rovnice je příslušná funkce.

My řešení nebudeme hledat matematicky, ale budeme se ho snažit uhodnout (Matematické řešení diferenciální rovnic druhého řádu je nad rámec středoškolské matematiky).

Naším úkolem je najít takovou funkci, kterou, pokud dvakrát zderivuji dostanu tu samou, ale se záporným znaménkem a vynásobenou konstantou k. Kde $k^2 = 2mE/\hbar^2$ Pokud se podíváme na tabulku derivací: např. v [17]

Pokud se dobře zadíváte na tyto funkce zjistíte, že jediné, které přicházejí v úvahu jsou $\sin x$, $\cos x$ a e^x. Pro nás je důležité, aby po dvojitém derivování vyšla stejná funkce jako na počátku, ale s mínusem.

Tabulka 2.2: Charakteristické veličiny

$f(x)$	$f'(x)$	$f''(x)$	splňuje požadavky?
$\sin x$	$\cos x$	$-\sin x$	ano
$\cos x$	$-\sin x$	$-\cos x$	ano
e^x	e^x	e^x	ne, její druhá derivace není záporná

Na počátku jsme požadovali, aby po dvojitém derivování vyšla stejná funkce, ale záporná a navíc ještě vynásobená konstantou k^2. Pokud přihlédneme ke vztahu pro derivování složené funkce:

$$[f(g(x))]' = g'(x)f'(g(x))$$

Recept na derivaci složené funkce: zderivuj vnitřní funkci a vynásob ji derivací vnější funkce, kde tu vnitřní pouze opíšeš.

Názorný příklad: $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} sin2x = 2cos2x$ ($2x$ je vnitřní funkce, $\sin x$ je vnější funkce.) Proto, abychom tedy dostali danou funkci vynásobenou konstantou k^2 je nutné, aby ve vnitřní části funkce bylo k obsaženo a to následujícím způsobem:

$$[\sin(kx)]'' = [k\cos(kx)]' = -k^2\sin(kx) \tag{2.5}$$

Což je přesně funkce, kterou hledáme. K přihlédnutí ke vzorci derivace funkce vynásobenou konstantou zjistíme, že řešením je $A\ \sin(kx)$ (kde A je libovolná konstanta nezávislá na x). Čtenář sám si tuto funkci může zderivovat a dojde k tomu, že tato funkce také vyhovuje Schrödingerově rovnici. Kromě $\sin x$ vyhovovala ještě elementární funkce $\cos x$. Pokud tedy má diferenciální rovnice tyto dvě řešení, pak jejich řešením je také jejich

lineární kombinace vynásobená příslušnými konstantami nezávislými na x. Obecné řešení tedy je:

$$\Psi = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

kde A a B jsou libovolné konstanty. Nyní je nutné využit vlastnosti vlnové funkce. Na tomto místě budeme potřebovat vlastnost (4) Vlnová funkce je spojitá. Mimo potenciálovou jámu je vlnová funkce rovna nule, aby byla zajištěno její spojitost je nutné, aby v bodech $x = 0$, $x = L$ byla také vlnová funkce rovna nule. Budeme tedy dále řešit jen Ψ uvnitř jámy.

Z následujících podmínek nám vycházejí dvě rovnice. V první rovnici pokládáme vlnovou rovnici rovnu nule a za souřadnici x dosazujeme x = 0.

$$\begin{aligned} \Psi(0) = 0A\sin(k.0)) + B\cos(k.0) &= 0 \\ B\cos 0 &= 0 \\ B &= 0 \end{aligned}$$

V druhé rovnici pokládáme vlnovou funkci rovnou nule a za souřadnici x dosazujeme $x = L$. Z předchozí rovnice už za B dosazujeme $B = 0$.

$$A\sin(kL) = 0$$

Z Řešení goniometrických rovnic z matematiky platí, že:

$$\sin x = 0$$

řešení takové rovnice je: $x = 2n\pi$, kde n je libovolné celé číslo. Pokud se vrátíme k předchozí rovnici dostáváme, že:

$$kL = n\pi$$

Kde místo k dosadíme $\sqrt{2mE}/\hbar$:

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L = n\pi$$

Z této rovnice vyjádříme E. Konkrétně použijeme tyto kroky:

- Vynásobíme h
- Vydělíme L
- Umocníme na druhou obě strany
- Vydělíme výrazem $2m$

Po těchto úpravách dostáváme:

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL}$$

Vraťme se ke vztahu pro vlnovou funkci:

$$\Psi = A\sin(kx)$$

Využijme vzorce.

$$kL = 2n\pi$$

Z tohoto vzorce vyjádříme k, a to uděláme tak, že rovnici podělíme L. Po dosazení do vzorce pro vlnou funkci dostáváme:

$$\Psi = Asin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Nyní ještě musíme využít podmínky (2), která je kladená na vlnovou funkci a to konkrétně její konečnosti. Z konečnosti vlnové funkce vyplývá, že funkce musí být normovaná. Normováním chápeme, že pravděpodobnost na celém prostoru musí být rovna 1 (tedy 100Pravděpodobnost spočítáme jako:

$$P = \int \rho \mathrm{d}x$$

Kde ρ je hustota pravděpodobnosti. Pro hustotu pravděpodobnosti platí vztah:

$$\rho = |\Psi|^2$$

V tomto bodě jen poznamenejme, že zatímco vlnová funkce neměla fyzikální význam. Její druhá mocnina absolutní hodnoty má význam hustoty pravděpodobnosti.

(Na tomto místě může být čtenáři zvláštní, proč současně uvádíme absolutní hodnotu i druhou mocninu. Pokud by se jednalo o reálná čísla, tak by samozřejmě stačilo uvést druhou mocninu, ale obecně není vlnová funkce reálná, ale komplexní. Jen uveďme, že komplexní čísla představují množinu stejně jako čísla přirozená, celá, racionální a reálná. Tato práce, ale záměrně předkládá pouze případy, kdy je vlnová funkce reálná a to pro snadnější pochopení a nemusíme se tedy snažit přesně pochopit, jak pracovat s komplexními čísly a funkcemi, pokud to neumíme).

Tato podkapitola byla inspirována texty: [1][7][10][11][14][16]

2.5 Pravděpodobnost a hustota pravděpodobnosti

Na tomto místě je nutné vysvětlit pojmy pravděpodobnost a hustota pravděpodobnosti. Pravděpodobnost je definována, tak že popisuje jako je šance, že se něco stane. Uvádíme zde samozřejmě i její přesnější definici:

$$P = \frac{m}{n}$$

Kde m je počet jevů příznivých a n je počet všech možných jevů. Uveďme si jednoduchý příklad: Jaká je pravděpodobnost, že na „běžné“ kostce padne sudé číslo?

Kostka má 6 čísel – 1, 2, 3, 4, 5, 6, tedy $n = 6$. Čísla, která jsou příznivá (jsou sudá) tedy čísla 2, 4, 6. Odtud plyne $m = 3$

Pravděpodobnost tedy je:

$$P = \frac{m}{n} = \frac{3}{6} = \frac{1}{2}$$

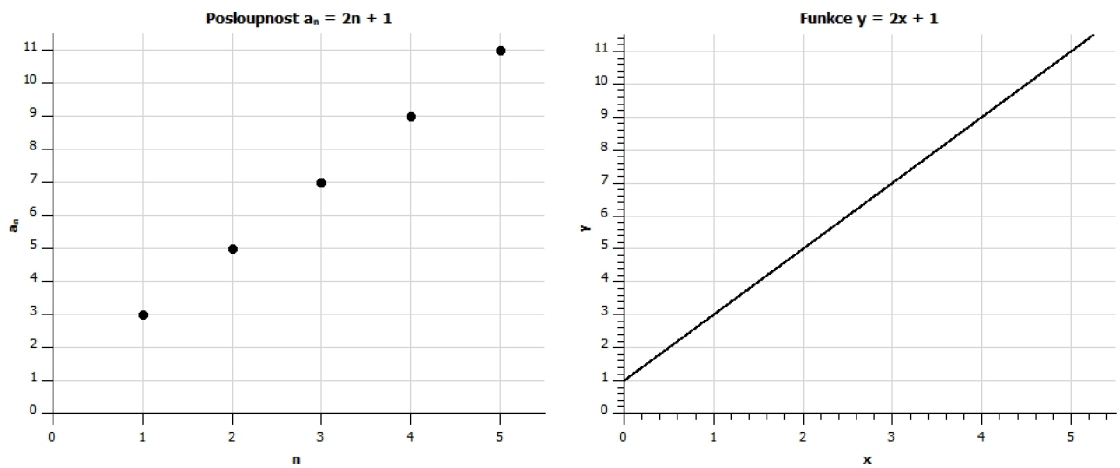
Nyní nás čeká ta obtížnější část a to vysvětlit, co je hustota pravděpodobnosti. Než, však budeme moci začít s tímto pojmem je nutné vysvětlit diskrétní a spojité fyzikální veličiny. Z matematického hlediska je spojitá fyzikální veličina popsána funkcí a diskrétní fyzikální veličina popsána posloupností

Uveďme na tomto místě nejprve středoškolskou definici funkce a posloupnosti: **Funkce** je předpis, který každé hodnotě x z definičního oboru (reálná čísla většinou) přiřadí nejvýše jednu (buď žádnou, nebo jednu) hodnotu y. Posloupnost je předpis, který každé hodnotě n z definičního oboru (přirozená čísla) přiřadí nejvýše jednu hodnotu a. Rozdíl mezi posloupností a funkcí je tedy v tom, že funkce vybírá z reálných čísel a posloupnost vybírá z přirozených čísel.

Dále ještě uveďme, že posloupnost i funkce zobrazují do reálných čísel. Zde je uvedena matematická formulace těchto pojmů.
Funkce je zobrazení $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$, popisuje spojité fyzikální veličiny.

Posloupnost je zobrazení $\mathbb{N} \to \mathbb{R}$, popisuje diskrétní fyzikální veličiny.

Na tomto místě ještě ukažme zobrazení grafů posloupnosti a funkce.



Obrázek 2.4: Srovnání grafu a posloupnosti

Pro diskrétní a spojité rozložení hodnot ukažme ještě 2 příklady z reálného života pro větší názornost. Začneme nejprve u spojité rozložení hodnot (funkce). Představme si, že budeme kupovat oříšky na váhu (ne každý oříšek váží stejně). Podle toho kolik oříšky váží, tak tolik zaplatíme. Podle funkce dané vztahem:

$$y = 300x$$

Kde x představuje množství oříšků v kg a y představuje cenu. Vidíme, že za x můžeme dosazovat libovolná reálná čísla (dosadíme jednoduše takovou hmotnost, kterou si zrovna jdeme koupit).

Nyní si ukážeme příklad diskrétního rozdělení hodnot (posloupnost). Představme si, že budeme kupovat jablka. Tentokrát ovšem budeme platit za kus nikoliv, však hmotnost. Podle toho kolik kusů jablek si koupíme tolik zaplatíme a to konkrétně dané vztahem:

$$a = 7,5n$$

Kde n představuje počet jablek a a představuje cenu, kterou zaplatíme. Obě 2 tyto závislosti jsou uvedeny v následujících grafech. Na tomto místě si představíme 2 případy vždy půjde o jevy, které jsou dány určitou pravděpodobností.

První případ je, že házíme dvěma „běžnými“ kostkami. Představme si, že je to modrá a červená kostka. Celkem existuje tedy 36 možností, které mohou nastat. Některé tyto možnosti ovšem dávají stejnou hodnotu. Ukázka v následující tabulce:

Do prvního řádku jsme napsali možné hodnoty součtu na obou kostkách a jedničku. Součet čísel jedna byl vybrán z toho důvodu, aby bylo ukázáno, že v obyčejné teorie pravděpodobnosti se může stát, že pravděpodobnost nějakého jevu je rovna nule (tedy jev je nemožný).

Do druhého sloupce jsme vypsali všechny možnosti jakými je možné daný součet na kostkách realizovat. V tabulce je vidět modré a červené rozlišení čísel. Je to z toho důvody, aby bylo vidět, že je rozdíl když padne na červené kostce 3 a na modré 4 a opačně.

Ve třetím sloupci je napsána číslem kolika možnostmi se daný součet realizovat. Všimněte si, že pokud sečteme všechna čísla ve třetím sloupci dostaneme číslo 36. Tedy počet všechny možných stavů. Je jasné, že na dvou kostkách musíme hodit číslo mezi 2-12 včetně a proto musím být jejich pravděpodobnost rovna 1. pravděpodobnost, jak již víme je součet všech příznivých děleno počtem možných což v tomto případě je 36/36 = 1 = 100%. Něco padnout musí.

Ve čtvrtém sloupci je za pomocí vzorce spočítána pravděpodobnost.

Na následujícím grafu je na vodorovné ose vynesena hodnota součtu, která mohla padnout na obou kostkách a na ose y pravděpodobnost, že se to stane.

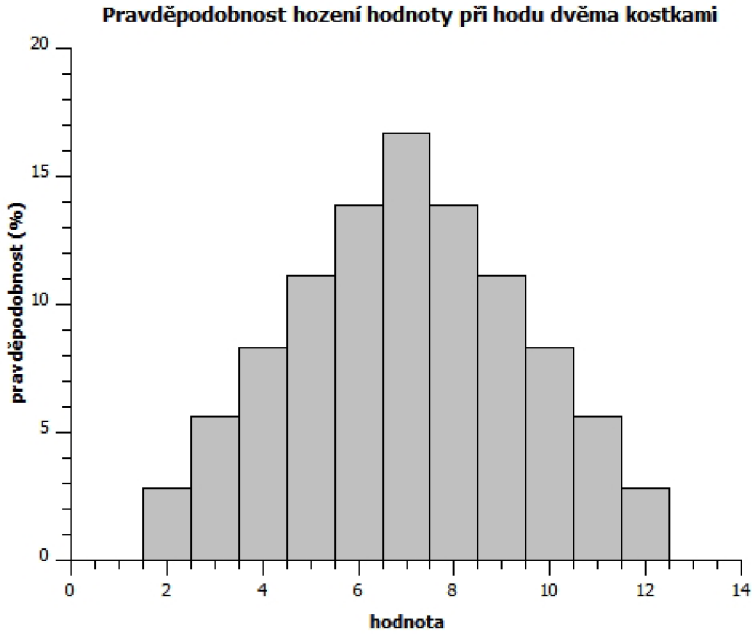
Tabulka 2.3: Charakteristické veličiny

hozená hodnota	možná čísla na kostkách (modrá,červená)	počet možností	pravděpodobnost hodnoty
1	-	0	$\frac{0}{36} = 0,00\,\%$
2	(1,1)	1	$\frac{1}{36} = 2,78\,\%$
3	(1,2) , (2,1)	2	$\frac{2}{36} = 5,56\,\%$
4	(1,3) , (3,1) , (2,2)	3	$\frac{3}{36} = 8,33\,\%$
5	(3,2) , (2,3) , (1,4) (4,1)	4	$\frac{4}{36} = 11,1\,\%$
6	(3,3) , (4,2) , (2,4), (5,1), (1,5)	5	$\frac{5}{36} = 13,9\,\%$
7	(4,3) , (3,4) , (2,5) (5,2) , (1,6) , (6,1)	6	$\frac{6}{36} = 16,7\,\%$
8	(4,4) , (3,5) , (5,3) (6,2) , (2,6)	5	$\frac{5}{36} = 13,9\,\%$
9	(5,4) , (4,5) , (6,3) (3,6)	4	$\frac{4}{36} = 11,1\,\%$
10	(5,5) , (6,4) , (4,6)	3	$\frac{3}{36} = 8,33\,\%$
11	(6,5) , (5,6)	2	$\frac{2}{36} = 5,56\,\%$
12	(6,6)	1	$\frac{1}{36} = 2,78\,\%$

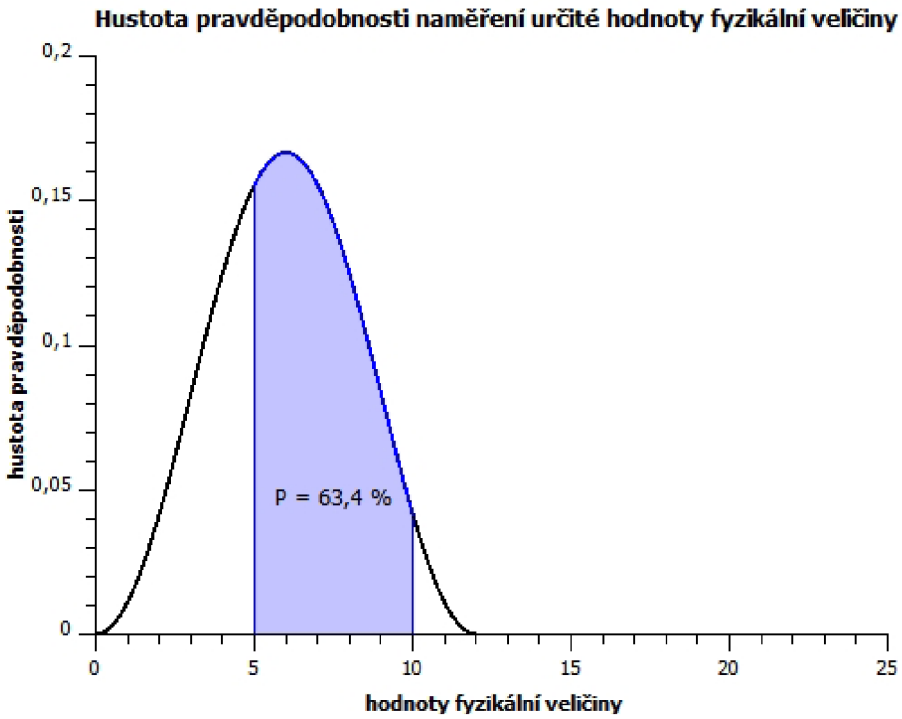
Druhý případ je ten, že máme matematický software, který vždy náhodně vybere nějaká reálné číslo mezi 2 a 12. Může tedy klidně vybrat 3,641. Stejně jako tomu bylo v předcházejícím případě všechny hodnoty nejsou stejně pravděpodobné. Právě funkce, která popisuje, jak moc je která hodnota pravděpodobná nazveme hustotou pravděpodobnosti. Pokusíme se nyní udat lepší definici hustoty pravděpodobnosti. Matematicky zapisujeme:

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}f}$$

kde f je zvolená spojitá fyzikální veličina a ρ je hustota pravděpodobnosti naměření nějaké hodnoty této veličiny. P určuje pravděpodobnost, že veličina má v nějakých mezí a a b nějakou hodnotu. Pro lepší názornost ukazujeme obrázek.



Obrázek 2.5: Pravděpodobnost hození hodnot na dvou kostkách



Obrázek 2.6: Ukázka vztahu mezi pravděpodobností a hustotou pravděpodobnosti

Na tomto obrázku je na ose x vidět možná čísla, která může software vygenerovat a na ose y je uvedena právě hustota pravděpodobnosti (červená čára=funkce). Pravděpodobnost je rovna podílu „modré vyšrafované plochy“ vydělenou celou plochou.

V integrálu volíme příslušné meze v prostoru, na kterém hledáme vlnovou funkci. Pokud zvolíme meze mezi a, b dostaneme nějakou pravděpodobnost. Pokud ovšem budeme vlnovou funkci hledat na celém prostoru, pak meze budou od mínus nekonečna do plus nekonečna a hodnota pravděpodobnosti musí být 1. Částice se musí někde nacházet, proto je pravděpodobnost rovná 1 = 100 %. Tuto skutečnost zapíšeme vzorcem (zde pro 1D):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \mathrm{d}x = 1$$

Tato podkapitola byla inspirována texty: [14][16][17][18][19][20].

2.6 Normování vlnové funkce

Nyní se již můžeme vrátit k hledání normovací konstanty A ve tvaru vlnové funkce:

$$\Psi = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Nejprve musíme z této funkci získat hustotu pravděpodobnosti a to podle vztahu:

$$|\Psi|^2 = |A|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Pokud si uvědomíme, že od mínus nekonečna do x = 0 a od x = L do plus nekonečna je vlnová funkce a tudíž její pravděpodobnost nalezení rovna nule. Z toho vyplývá, že pokud budu hledat vlnovou funkci od x =0 až k x = L musí být pravděpodobnost nalezení 1 = 100 %. Tento fakt nám upravíme meze integrálu takto:

$$\int_0^L |\Psi(x)|^2 \mathrm{d}x = \int_0^L |A|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \mathrm{d}x = 1$$

Nyní je nutné vyřešit integrál na levé straně, abychom zjistili čemu je levá strana rovna a mohli jsme vzniklou rovnici vyřešit a zjistili jsme čemu je rovna konstanta A. Nejprve před integrál vytkneme konstatntu A. dostaneme tedy:

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \mathrm{d}x = 1$$

Nyní je nutné zavést substituci:

$$\frac{n\pi x}{L} = u$$

Z toho vyplává, že:

$$\frac{n\pi \mathrm{d}x}{L} = \mathrm{d}u$$

Z druhé rovnice vyjádříme dx jako:

$$\mathrm{d}x = \frac{L}{n\pi}\mathrm{d}u$$

Integrálu je ještě třeba upravit meze (místo x dosadíme krajní meze původního integrálu a vyjdou nám nové meze integrálu pro u):

$$\begin{aligned} x = 0 \quad u &= \frac{n\pi x}{L} = 0 \\ x = L \quad &= \frac{n\pi x}{L} = n\pi \end{aligned}$$

Toto dosadíme do integrálu a dostáváme (nové meze a místo dx vztah odvozený nahoře):

$$|A|^2 \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2(u)\mathrm{d}u = 1$$

Tento integrál se řeší využitím vztahů z goniometrie. Využijeme vztahů z goniometrie, které se dají najít v matematických tabulkách, nebo v gymnaziální učebnici matematiky, kde je uveden jejich důkaz:

$$\sin^2 u = \frac{1-\cos(2u)}{2}$$

Po dosazení do integrálu dostáváme:

$$|A|^2 \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} \frac{1-\cos(2u)}{2}\mathrm{d}u = 1$$

Tento integrál lze rozdělit na dva a druhý integrál lze řešit substitucí $2u = t$. Ve výsledku dostáváme:

$$|A|^2 \frac{1}{2} n\pi = 1$$

Z rovnice nám tedy vyplývá, že konstanta A je rovna:

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Dva nejdůležitější závěry této části jsou:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi}{2mL^2} n^2$$

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Uveďme, že za pomoci energie jsme schopni získat hybnost částice. A to pokud uvážíme, že pro hybnost a energii platí vztahy:

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2mE} = \frac{\hbar \pi n}{L}$$

Můžeme také vypočítat rychlost:

$$v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar \pi n}{mL}$$

Význam těchto výsledků a jejich použití v příkladech bude diskutován později. Nyní chceme čtenáři ukázat, jak se dá k podobným výsledkům dostat na základě toho, že si částici představíme jako stojatou vlnu. To, že je tato představa možná jsme vyložili v první kapitole, kde jsme našli souvislosti mezi hybností částice a její vlnovou délkou. V této kapitole jsme také ukázali popis stojatých vln, které budeme nyní používat. Cílem bude se dostat, ke stejným dvěma základním rovnicím pro energii a vlnovou funkci.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [3][4][7][10][11][12].

2.7 Řešení pomocí stojaté vlny

Nyní už je na čase ukázat paralelu mezi částicí v jámě a stojatou vlnou. V předchozí kapitole jsme zjistili, že pokud je částice omezena stejně jako např struna. Lze částici v nekonečně hluboké potenciálové jámě popsat stejnými vztahy. Vztah mezi vlnovou délkou λ a délkou struny L:

$$\lambda = \frac{2}{n} L$$

V našem případě má L význam šířky potenciálové jámy a n má význam kvantového čísla. Zkusme nyní pomocí paralely se strunou spočítat hybnost a energii částice v jámě. Nejprve využijeme vztahu pro de Broglieho vlnovou délku, abychom vypočetli hybnost částice:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hn}{2L}$$

a vyjádřeme ji ještě pomocí redukované Planckovy konstanty, vyjde:

$$p = \frac{\hbar \pi n}{L}$$

což odpovídá výsledku, který nám vyšel z řešení Schrödingerovy rovnice. Spočtěme ještě energii částice:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$

Kromě energie a hybnosti můžeme také naleznout tvar vlnové funkce. Zkrátka použijeme rovnici, ke které jsme dospěli pro strunu, a vyměníme klasickou výchylku struny za vlnovou funkci a amplitudu za neznámou konstantu A. Pro srovnání jsou oba vztahy níže:

$$y = y_m \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$
$$\Psi = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$

nakonec dosadíme za vlnovou délku vztah mezi vlnovou délkou a délkou struny

$$y = y_m \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$
$$\Psi = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$

Opět vidíme, že vztah nalezení vlnové funkce Schrödingerovou rovnicí a paralelou ke stojaté vlně nám dal stejný výsledek.

Na tomto místě by mohl vzniknout názor, že řešení kvantově mechanických problémů je jednoduší přes paralelu se stojatou vlnou než Schrödingerovou rovnicí. Uveďme, že možnost řešit to jednoduchým způsobem přes paralelu ke stojaté vlně je možné jen v nejjednodušším případě tzv. Nekonečně hluboké potenciálové jámy. Tento způsob by nefungoval na příklad uváděný v další kapitole a to na atom vodíku. Řešení Schrödingerovou rovnicí je tedy matematicky obtížnější, ale mnohem obecnější.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [1][4][10].

Kapitola 3

Podivnosti mikrosvěta

3.1 Kvantování fyzikálních veličin

První podivností je tzv. kvantování fyzikálních veličin. V klasické mechanice jsme zvyklí, že hybnost může nabývat libovolných hodnot. Velikost hybnosti je dána tímto vztahem:

$$p = mv$$

A jelikož v klasické fyzice může hmotnost i rychlost nabývat libovolných hodnot (u rychlosti menší než je rychlost světla), tak může i hybnost nabývat libovolných hodnot. Na chvíli uvažujme, jak by vypadal náš makrosvět (svět na, který jsme zvyklý našili smysly) kdyby např. rychlost byla kvantována.

Tento odstavec je pouze ilustrativní nepředstavuje reálnou fyzikální situaci. Pouze se na něm pokusíme demonstrovat, jak by vypadalo kvantování v makrosvětě. Uvažujme situaci, kdy běží náš „kvantový běžec“. Jelikož je to „kvantový běžec“, tak je jeho rychlost kvantovaná a může nabývat pouze určitých hodnot.

Uvažujme, že náš „kvantový běžec“ běží po rovné silnici a jeho rychlost je kvantovaná podle vztahu. (Znovu upozorňujeme, že se jedná pouze o ilustrativní příklad na pochopení podivností kvantové fyziky a ne reálnou situaci).

$$v = n.5\,\mathrm{km/h}$$

V tomto vztahu je v základní rychlost a n kvantové číslo pro tento případ. Za n (kvantové číslo) můžeme dosazovat pouze přirozená čísla. V následující tabulce jsou vidět některé možné a nemožné rychlosti a příslušná kvantová čísla.

Tabulka je uvedena pouze pro 3 povolené kombinace a 3 zakázané, ale povolených i zakázaných možností je nekonečně mnoho. Na tomto místě poznamenejme, že nemožné kombinace nemohou v daném místě nikdy nastat. Prostě náš kvantový běžec se nemůže pohyb jinými než povolenými rychlostmi. Naše smysly nás v tomto zklamou, protože si takový pohyb nedokážeme představit. Prostě během evoluce jsme se s ničím takovým nesetkali a musíme věřit experimentu a matematice. O kvantová mechanice mluvíme právě,

Tabulka 3.1: Příklady povolených a zakázaných hodnot rychlosti ”kvantového běžce”

Příslušná rychlost	Povolená/zakázaná	Kvantové číslo
v = 5 km/h	povolená	n = 1
v = 25 km/h	povolená	n = 5
v = 15 km/h	povolená	n = 3
v = 7 km/h	zakázaná	neexistuje
v = 0 km/h	zakázaná	neexistuje
v = 11,4 km/h	zakázaná	neexistuje

protože daná fyzikální veličina se můžeme měnit pouze po kvantech. V našem případě je dané nejmenší kvantum rychlosti v = 5 km/h.

Na tomto místě ukažme ještě jeden vymyšlený příklad pro lepší pochopení. Jako příklad můžeme vzít „kvantové zvíře co skáče přes překážky“. Výška jeho výskoku bude tedy kvantovaná a to podle vztahu.

$$h = n.0,5\,\mathrm{m}$$

Opět ukažme tabulku, ve které budou vidět povolené a zakázané kombinace výšky výskoku,

Tabulka 3.2: Příklady povolených a zakázaných hodnot výšky výskoku ”kvantového zvířete”

Příslušná výška	Povolená/zakázaná	Kvantové číslo
h = 0,5 m	povolená	n = 1
h = 1,5 m	povolená	n = 3
h = 4 m	povolená	n = 8
h = 0,2 m	zakázaná	neexistuje
h = 3,7 m	zakázaná	neexistuje

Tabulka je uvedena pouze pro tři povolené kombinace a dvě zakázané, ale povolených i zakázaných možností je nekonečně mnoho. V tomto případě je dané nejmenší kvantum výšky $h = 0,5$ m. Nyní ještě definujeme jeden pojem. Tímto pojmem je základní stav. Pro případ, kdy je kvantové číslo ($n = 1$) mluvíme o základní stavu.

Na tomto místě už se pokusme ukázat, jak bude vypadat kvantování energie pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu. Odvozený vztah pro energii nekonečně hluboké potenciálové jámy vypadá takto.

$$E = \frac{h^2}{8mL} n^2 \tag{3.1}$$

V následující rovnici je vidět barevné odlišení. Důvod tohoto barevného odlišení je následující:

- červená: popis parametrů částice a systému (hmotnost m a šířka nekonečně hluboké potenciálové jámy L)
- modrá: popis stavu, ve kterém se daná částice nachází (kvantové číslo n)

Pokud budeme chtít vidět nějaké konkrétní hodnoty energie je třeba zvolit konkrétní systém. Zvolme elektron ($m = 9,11.10^{-31}$ kg) v nekonečně hluboké jámě o šířce $L = 10^{-10}$ m. Po dosazení těchto parametrů je energie rovna:

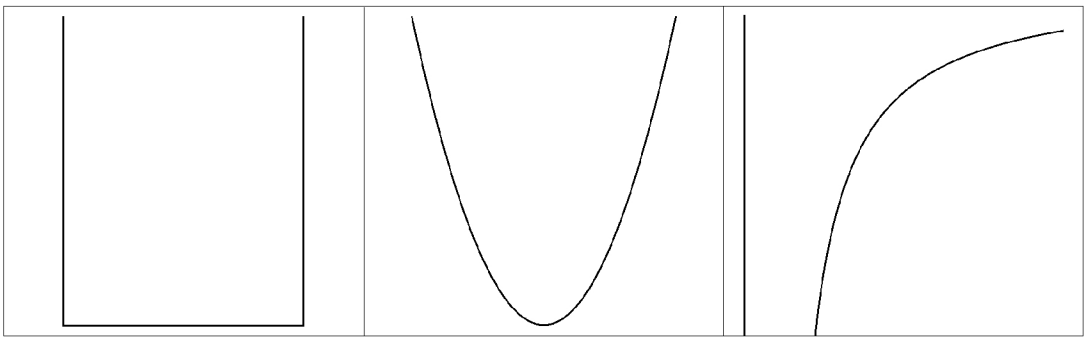
$$E = \frac{h^2}{8mL} n^2 \sim 6,02\,.\,10^{-28}\,\mathrm{J}\,.\,n^2$$

Pokud zvolíme $n = 1$, tak dostaneme pro energii hodnotu:

$$E_1 = 6,02\,.\,10^{-28}\,\mathrm{J}$$

Jak již bylo uvedeno v této podkapitole, tak pokud hovoříme o energii se kvantovým číslem (n = 1) mluvíme o základním stavu. Základní stav elektronu v této jámě má tedy energii $6,02\,.\,10^{-28}$ J

Nyní ukažme tři nejjednodušší kvantové systémy a to konkrétně Nekonečně hlubokou potenciálovou jámu, harmonický oscilátor a atom vodíku. Nebudeme zde rozebírat přesně, jak tyto systémy vypadají. Nekonečně hlubokou potenciálovou jámu jsme v této kapitole vysvětlili podrobně. Atom vodíku vysvětlíme v následující kapitole. V této kapitole uvádíme pouze pro energie v jednotlivých systémech v závislosti na kvantovém čísle. Je to zde pouze, proto, abychom se mohli seznámit s různými možnostmi závislosti energie na kvantovém čísle.



Obrázek 3.1: Nekonečně hluboká potenciálová jáma, harmonický oscilátor a atom vodíku

Pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu má vztah pro energii tvar.

$$E = \frac{h^2}{8mL} n^2 \tag{3.2}$$

Z tohoto vztahu lze usoudit, že s rostoucí hodnotou kvantového čísla roste i energie a to konkrétně kvadraticky. Pokud totiž dosadíme za veličiny popisující charakteristiku systému (modré veličiny) konstantu a (máme konkrétní systém s šířkou jámy a hmotností). Dále by nás ještě mohla zajímat rychlost růstu energii s růstem kvantového čísla. Pokud nás zajímá rychlost růstu funkce je třeba spočítat derivaci. Význam derivace je totiž rychlost růstu funkce v daném bodě. Nyní již tedy spočítáme derivace funkce (na hmotnost a šířku jámy se díváme jako na konstantu). Derivace tedy je:

$$\mathrm{d}E/\mathrm{d}n = \frac{\mathrm{d}\frac{h^2}{8mL}}{\mathrm{d}n} = \frac{h^2}{4mL} n \tag{3.3}$$

Vidíme, že opět dostáváme funkci, která je rostoucí a to konkrétně lineárně. Tedy s rostoucím kvantovým číslem roste energie stále rychleji. Nyní je třeba se podívat na energii lineárního harmonického oscilátoru. Bez dalšího vysvětlování uveďme vztah pro energii:

$$E = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + n \right)$$

V tomto vztahu je $\hbar$ redukovaná Planckova konstanta, ω je frekvence kmitů částice. Z tohoto vztahu je vidět, že energie závisí na kvantovém čísle lineárně. Opět nás tedy může zajímat růst energie. K tomu je nutné spočítat derivaci energie v závislosti na kvantovém čísle. Tato závislost tedy vypadá takto:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}n} = \frac{\mathrm{d}\hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right)}{\mathrm{d}n} = \hbar\omega$$

Vidíme, že tento vztah neobsahuje hodnotu kvantového čísla a z toho tedy vyplývá, že růst energie je na kvantovém čísle nezávislý. Jedná se tedy o konstantní funkci. Z tohoto vyplývá, že energie lineárního harmonického oscilátoru roste, ale pořád o stejnou hodnotu (na rozdíl od jámy a atomu vodíku). Nyní si napíšeme vztah pro energii v atomu vodíku. uvedený vztah je pro orbital 1s. Kvantové číslo, o kterým budeme mluvit se nazývá hlavním kvantovým číslem. V následující kapitole Vám atom vodíku včetně pojmů orbital a hlavní kvantové číslo důkladně popíšeme. Nyní tento výsledek přijmeme jako fakt podívám se na něm na podivnost z kvantováním. Energie atomu vodíku tedy je:

$$E = \frac{me^4}{8h^2\varepsilon_0 n^2}$$

V tomto vztahu jsou černě všechny konstanty, a dají se tedy vyčíslit. Po vyčíslení konstant přibližně dostáváme.

$$E = -13{,}6\,\mathrm{eV} \,.\, \frac{1}{n^2}$$

Zde by nás mohla opět zajímat rychlost růstu a k tomu je nutné spočítat derivace energie podle hlavního kvantového čísla. Tato derivace má hodnotu.

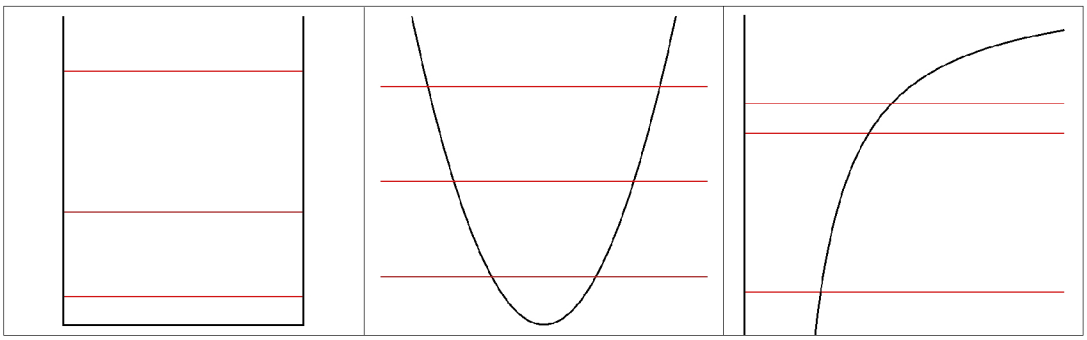
$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}n} = \frac{\mathrm{d} - 13{,}6\,\mathrm{eV}\,.\,\frac{1}{n^2}}{\mathrm{d}n} = \frac{27{,}2\,\mathrm{eV}}{n^2}$$

Zde vidíme, že derivace klesá s třetí mocninou kvantového čísla. Energie tedy bude zase růst, ale tento růst bude zpomalovat.

Tabulka 3.3: Spektra energie podle tvaru potenciálu

tvar potenciálu	$E(n)$	$\frac{\mathrm{d}E(n)}{\mathrm{d}n}$	popis spektra energie
nekonečně hluboká jáma	$\frac{h^2}{8mL}n^2$	$\frac{h^2}{4mL}n$	se zvyšujícím se kvantovým číslem energie roste, a to čím dál rychleji (rozestupy mezi hladinami se zvětšují)
lineární harmonický oscilátor	$\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)$	$\hbar\omega$	se zvyšujícím se kvantovým číslem energie roste, a to stále o stejnou hodnotu (rozestupy mezi hladinami se nemění)
atom vodíku	$\frac{me^4}{8h^2\varepsilon_0 n^2}$	$\frac{me^4}{4h^2\varepsilon_0 n^3}$	se zvyšujícím se kvantovým číslem energie roste, a to čím dál méně (rozestupy mezi hladinami se zmenšují)

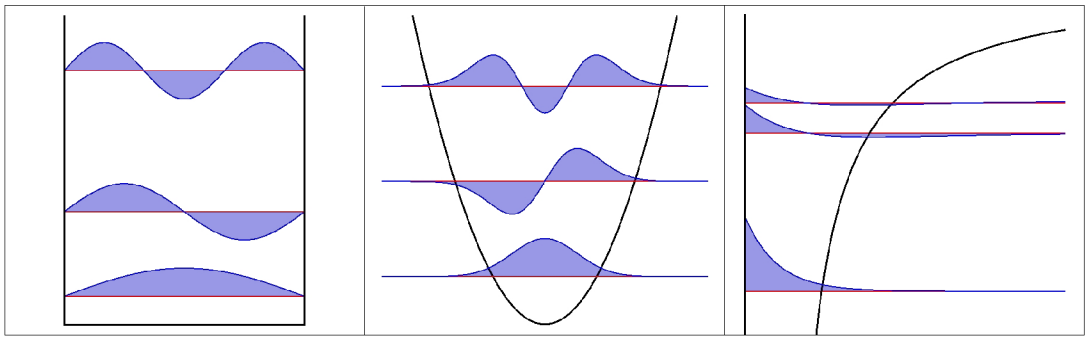
Tyto závěry si můžeme ještě prohlédnout na následujících obrázcích.



Obrázek 3.2: Hladiny energie částic v různých potenciálech

Na těchto obrázcích je vidět, že energetické hladiny se k sobě přibližují v atomu vodíku. Jsou od sebe stále stejně daleko lineární harmonický oscilátor. Vzdalují se od sebe pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu.

Nyní si ještě pro první tři hodnoty kvantového čísla můžeme prohlédnout vlnové funkce třech nejjednodušších systémů (nekonečně hluboké potenciálové jámy, lineární harmonický oscilátor a atom vodíku)



Obrázek 3.3: Různé tvary jednoduchých potenciálů

Nyní je ještě důležité uvést na pravou míru jeden fakt o diskrétní a spojitých fyzikálních veličin. Nyní uvedeme jednu nepřesnou formulaci, abychom ji mohli uvést na pravou míru. Z předchozích příkladů by se mohlo zdát, že pokud popisujeme systém klasickou fyzikou bude závislost fyzikálních veličin spojitá (funkce), ale pokud ho popisujeme kvantovou mechanikou bude závislost fyzikálních veličin diskrétní (posloupnost). Tato formulace ovšem není správná. Správná je pouze její první část. Přeformulujte předchozí tvrzení na pravdivé:

Pravdivé tvrzení:

Pokud popisujeme systém klasickou fyzikou bude závislost fyzikálních veličin spojitá (funkce), ale pokud ho popisujeme kvantovou mechanikou bude závislost fyzikálních veličin diskrétní (posloupnost), nebo může být spojitá (funkce) závisí na konkrétním systému i jednotlivých parametrech (např. energie částice)

Nepravdivé tvrzení:

Pokud popisujeme systém klasickou fyzikou bude závislost fyzikálních veličin spojitá (funkce), ale pokud ho popisujeme kvantovou mechanikou bude závislost fyzikálních veličin diskrétní (posloupnost).

Nyní ještě ukažme některé kvantové systémy pro které platí, že jejich energie není kvantovaná. Prvním takovým příkladem je tzv. volná částice. Pod pojmem volná částice budeme rozumět situaci, kdy máme libovolnou částici např. elektron, na kterou nepůsobí žádné pole. Od případu nekonečně hluboké potenciálové jámy se to liší v tom, že uvnitř jámy pole nebylo a mimo ni bylo pole s nekonečnou potenciální energií. U volné částice se bude jednat o systém, kde na celém prostoru je potenciální energie nulová.

Vlnová funkce pro volnou částici se dá vyřešit přes Schrödingerovu rovnici (jako každý jiný kvantově mechanický systém). My se zde omezíme pouze na konstatování řešení a jeho význam. Vlnová funkce pro volnou částici má tvar:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sin\left(\frac{p}{\hbar}x + \frac{E}{\hbar}t\right)$$

Vidíme, že tato funkce je přesně stejná jako funkce popisující postupnou vlnu po dosazení dle Broglieho hypotézy a Planckovy hypotézy. Tuto postupnou vlnu včetně

zavedení těchto dvou hypotéz do rovnice vlny jsme už řešili na konci první kapitoly. Dále jen uveďme, že je logické, že volná částice má stejný výsledek jako postupná vlna, protože volná částice je systém, kde je nulová potenciální energie (žádná energie) a postupná vlna je popis vlnění, kde není žádné omezení (např. vlna na volné vodní hladině). Nyní si ukážeme tabulku, ve které shrneme výsledky klasických systémů a jejich podobných kvantovým systémům s důrazem na spojitost a diskrétnost.

Tabulka 3.4: Porovnání volné částice s částicí uzavřenou v jámě

kvantově-mechanický systém	volná částice	částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě
podobný systém v mechanice vln	postupná vlna	stojatá vlna
rovnice	$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sin(\frac{p}{\hbar}x)$	v jámě: $\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right)$ mimo jámu: $\Psi = 0$
existence kvantového čísla	neexistuje	existuje
diskrétní nebo spojité fyzikální veličiny	spojité	diskrétní

Upozorňujeme opět na to, že i přestože je volná částice popisována modelem kvantové mechaniky v popisu jejích fyzikálních veličin (Energie, hybnosti ani vlnové funkce) se neobjevuje žádné kvantové číslo a to z toho důvodu, že fyzikální veličin popisující volnou částici mohou nabývat libovolných hodnot, které jim dovolí daná situace.

Z následujících řádků bychom mohli získat pocit, že buď je daný systém v kvantové mechanice buď popsán diskrétními fyzikálními veličinami, nebo spojitými fyzikálními veličinami (volná částice byla popsána spojitými fyzikálními veličinami, nekonečně hluboká potenciálová jáma byla popsána diskrétními fyzikálními veličinami) Existují, však i systémy, které mohou být buď popsány diskrétními, nebo spojitými fyzikálními veličinami v závislosti na energii částice, která se v nich nachází.

My si zde ukážeme dva takové systémy a to konečně hlubokou potenciálovou jámu a atom vodíku. Nejprve se budeme zaobírat konečně hlubokou potenciálovou jámou. Konečně hluboká potenciálová jáma se od nekonečně hluboké potenciálové jámy liší, tak že potenciální energie mimo jámu je konečná (zatímco u nekonečně hluboké potenciálové jámy byla nekonečná). Velikost potenciální energii uvnitř jámy zvolme 0 a velikost energie mimo jámu označme V.

Nyní může dojít ke dvěma základním možnostem podle velikosti hodnoty E.

1) $E > V$:

Energie částice je větší než potenciální energie mimo jámu. V takovém to případě je částice v jámě uzavřená pouze teoreticky. Má totiž energii nutnou k tomu, aby se dostala z jámy ven, a proto se bude chovat jako volná částice a bude tedy popsána spojitými fyzikálními veličinami

2) $E < V$:

Energie částice je menší než potenciální energie mimo jámu. V takovém případě je částice v jámě „uzavřena“. Bude popisována diskrétními hodnotami fyzikálních veličin. Tyto diskrétní hodnoty konečně hluboké potenciálové jámy ovšem budou vypadat jinak než u nekonečně hluboké potenciálové jámy a budou závislé na energii V. (Dále jen uveďme na pravou míru tvrzení, že bude částice „uzavřená v jámě“. Ve skutečnosti existuje nenulová pravděpodobnost, že se dostane i do prostoru, kde by se podle klasické fyziky nacházet nemohla (mimo jámu). Toto je další podivnost, kterou nazýváme tunelování. Dále se jí již zaobírat nebudeme.

Oba tyto závěry je samozřejmě možné získat řešením Schrödingerovy rovnice. Toto matematické řešení je pro nás v tuto chvíli příliš obtížné, ale nadaným čtenářům lze doporučit např. [12]

Nyní si stejnou paralelu ukážeme u atomu vodíku, opět jsou možné 2 stejné možnosti.
1) $E > V$:

Energie částice např. elektronu je větší než potenciální energie, kterou vytváří jádro atomu. Tedy elektron má dostatečnou energii, aby se dostal mimo atom. V takovém případě již veličiny popisující elektron nejsou kvantované, ale jsou spojitá. Takový to elektron získáme tak, že dodáme elektronu v základním stavu (n = 1) energii ve formě tepelného, nebo světelného záření a tím ho uvolníme. Pokud dodáme energii ve formě světelného záření mluvíme o fotoelektrickém jevu, který byl již zmíněn v předchozí kapitole.
2) $E < V$:

Toto je případ kdy energie elektronu je menší než potenciální energie, kterou vytváří jádro atomu. V tomto případě je elektron vázán k jádru a fyzikální veličiny ho popisující jsou diskrétní fyzikální veličiny. Toto splňují nejen elektrony v základním stavu, ale i elektrony kterým je dodáno světelným či tepelným záření menší množství energie než je nutné k jeho uvolnění. Potom elektron postoupí na vyšší energetickou hladinu a my mluvíme o procesu zvaném excitace.

V tuto chvíli je na čase si připomenout jednu ze zásad úspěšné fyzikální teorie a to tu, že úspěšná teorie musí být v souladu se starší již ověřenou teorií. Samozřejmě jí může zpřesňovat a zobecňovat (to je dokonce podmínka – musí předpovědět něco nového). Ale pokud do rovnic nové fyzikální teorie dosadíme podmínky, kterým vyhovovala stará vědecká teorie musí se výsledky obou teorií shodovat.

Jako příklad uvedeme dvě teorie, se kterými jste se již setkali, jsou jimi Einsteinova speciální teorie relativity a Newtonova teorie. Konkrétně se z nich podíváme pouze na jednu věc, a to na sčítání rychlostí.

Newtonova teorie v klasické mechanice platí pro rychlosti mnohem menší než je rychlost světla. Představme si situaci, kdy jdeme nahoru po jedoucím eskalátoru. Vůči eskalátoru jdeme rychlostí u. eskalátor se pohybuje vůči lidem stojící pod eskalátorem rychlostí v. Rychlost jako se my pohybujeme vůči lidem stojícím pod eskalátorem je dána vztahem:

$$w = v + u$$

Podle einsteinovy teorie skládání rychlostí dáno vztahem:

$$w\frac{u+v}{1+\frac{uv}{c^2}}$$

Kde u a v mají stejný význam jako předcházejícím případě a c je rychlost světla. Matematicky lze vyjádřit, že pokud je rychlost u a rychlost v mnohem menší než rychlost světla, tak platí:

$$\frac{u}{c} \to 0 \qquad \frac{v}{c} \to 0$$

Pokud tuto skutečnost dosadíme do vzorce pro Einsteinovo sčítání rychlostí dostaneme:

$$w = \frac{u+v}{1+0} = u+v$$

Vidíme, že tento výraz přechází pro malé rychlosti v Newtonovu teorii.

Nyní už jsme si ukázali, co to znamená, že pro speciální případ musí nová teorie přejít na teorii starou. Nyní musíme tuto skutečnost ověřit pro kvantovou mechaniku. Musíme, ale nejprve zjistit jaká veličina se bude blížit nule případně nekonečnu. V teorii relativity jsme viděli poměr u/c a v/c se blížil nule.

Na to, jak to bude v kvantové mechanice nám napoví následující příklad z klasické fyziky. Uvažujme obyčejný fotbalový míč který se pohybuje v jámě. Samozřejmě, aby se tam míč vešel musí být jáma odpovídající šířky. Uvažujme např. šířku jámy 1 m. ke zjištění energie míče je potřeba znát jeho rychlost a hmotnost uvažujme např. míč o hmotnosti 0,5 kg se pohybuje rychlostí 2 m/s. Nyní již vypočteme kinetickou energii podle vztahu.

Nyní již známe kinetickou energii. Můžeme si tedy napsat vztah pro energii částici v nekonečně hluboké potenciálové jámy:

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}.0,5.2^2 = 1$$

V tomto vztahu jediná veličina, kterou neznáme je kvantové číslo. Takže si ji vyjádříme a to konkrétně těmito kroky: Vynásobením rovnicí členem $8mL$ a poté vydělím h^2 a nakonec odmocněním celé rovnice. Dostáváme tedy:

$$E = \frac{\hbar}{8mL}n^2$$

Vidíme, že kvantové číslo je u situací ve světě pozorovaného našimi smysly (makrosvětě) velmi vysoké. Lze tedy formulovat podmínku, při které by výsledky kvantové mechaniky měly přejít na výsledky klasické fyziky:

$$n \to \infty$$

Kvantová mechanika musí pro velmi velké hodnoty kvantového čísla přejít v teorii klasické mechaniky. To, že výsledky kvantové mechaniky přejdou ve výsledky klasické fyziky lze říct, že se diskrétní hodnoty fyzikálních veličin (kvantová mechaniky) přejdou

na spojité hodnoty fyzikálních veličin. Dá se to tedy vyjádřit, tak že pro velké hodnoty kvantového čísla (n) se stane to, že sousední energetické hladiny jsou téměř totožné. V limitě matematicky formulujeme tuto podmínku takto:

$$E_{n+1} = E_n \qquad \text{pro } n \to \infty$$

Tuto rovnici vydělíme E_n a získáváme:

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = 1$$

Je třeba ověřit pro tři základní kvantově mechanické systémy (nekonečně hluboká potenciálová jáma, lineárně harmonický oscilátor, atom vodíku), že splňují tuto rovnici. Začneme nejprve nekonečně hlubokou potenciálovou jámou. Nejprve si připomeneme energii nekonečně hluboké potenciálové jámy:

$$E = \frac{\hbar}{8mL} n^2$$

Nyní to dosadíme do vztahu.

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = \frac{\frac{h^2(n+1)^2}{8mL^2}}{\frac{h^2n^2}{8mL^2}} = \frac{(n+1)^2}{n^2} = \frac{n^2+2n+1}{n^2} = \frac{n^2}{n^2} + \frac{2n}{n^2} + \frac{1}{n^2} = 1 + \frac{2}{n} + \frac{1}{n^2} \to 1$$

V této rovnici jsme nejprve pokrátili Planckovu konstantu, hmotnost a šířku potenciálové jámy. Poté jsme roznásobili závorku druhou mocninou a rozdělil jsme sčítance na jednotlivé členy a nakonec jsme tyto členy pokrátili. Pokud jsme se setkali s limitami je nám jasné, že druhý a třetí člen se rovnají nule. (pokud jsme se s limitami nikdy nesetkali je možné si za n dosazovat postupně větší a větší čísla a sledovat, jak se výsledek stále více blíží nule) Nyní budeme pokračovat s lineárním harmonickým oscilátorem. Nejprve si připomeneme energii lineárního harmonického oscilátoru:

$$\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)$$

Nyní dosadíme do vztahu

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = \frac{\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n+1\right)}{\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)} = \frac{n+1}{n} = 1 + \frac{1}{n} \to 1$$

V této rovnici jsme nejprve pokrátili závorku obsahující frekvenci a Planckovu konstantu. Poté jsme opět rozdělil sčítance na jednotlivé členy a nakonec jsme tyto členy pokrátili. Pokud jsme se setkali s limitami je nám jasné, že druhý a třetí se rovná nule. (pokud jsme se s limitami nikdy nesetkali je možné si za n dosazovat postupně větší a větší čísla a sledovat, jak se výsledek stále více blíží nule) Poslední systém, který vyšetříme je atom vodíku. Jeho energie je dána vztahem:

$$E = \frac{me^4}{8h^2\varepsilon_0 n^2} = -k\frac{1}{n^2}$$

Naposledy dosadíme do vztahu:

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = \frac{-k\frac{1}{(n+1)^2}}{-k\frac{1}{n^2}} = \frac{n^2}{(n+1)^2} = \frac{n^2}{n^2+2n+1} \to 1$$

V této rovnici jsme nejprve pokrátili konstantu k. Poté jsme roznásobili závorku ve jmenovateli. (pokud jsme se s limitami nikdy nesetkali je možné si za n dosazovat postupně větší a větší čísla a sledovat, jak se výsledek stále více blíží nule) Limita v posledním kroku se řeší L'Hospitalovým pravidlem. (pokud jsme se s limitami nikdy nesetkali je možné si za n dosazovat postupně větší a větší čísla a sledovat, jak se výsledek stále více blíží nule)

Vidíme, že pro všechny tři systémy jsme si potvrdili teorii, že pro velké hodnoty kvantového čísla přechází kvantová mechanika v klasickou.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [1][3][6][7][10][11][12][17].

3.2 Pravděpodobnostní charakter

Druhou podivností mikrosvěta je tzv. pravděpodobností charakter. Než přejdeme k vysvětlení pravděpodobnostního charakteru v kvantové mechanice, tak si připomeneme, jak by se na řešení dívala klasická mechanika. Představme si, že nás zajímá jakou dráhu urazí těleso, které má počáteční rychlost 5m/s zrychlení 1 m/s2 za 10 sekund.

Vidíme, že těleso urazí dráhu 100 metrů. Pokud tedy známe zrychlení a počáteční podmínky (je přesně zadaný stav tělesa), tak dokážeme vzdálenost o, kterou se těleso posunulo určit s jistotu. Víme, že se bude nacházet 100 metrů od původního místa. V klasické fyzice tedy žádný pravděpodobností charakter nevystupuje.

Namísto toho se v kvantové mechanice pravděpodobnostní charakter uplatňuje. Jako příklad si vezmeme částici v nekonečně hluboké potenciálové jámě. Pro tuto částici budeme znát všechny informace, které potřebujeme, abychom znali její stav. Tedy budeme znát vlnovou funkci, která je dána vztahem:

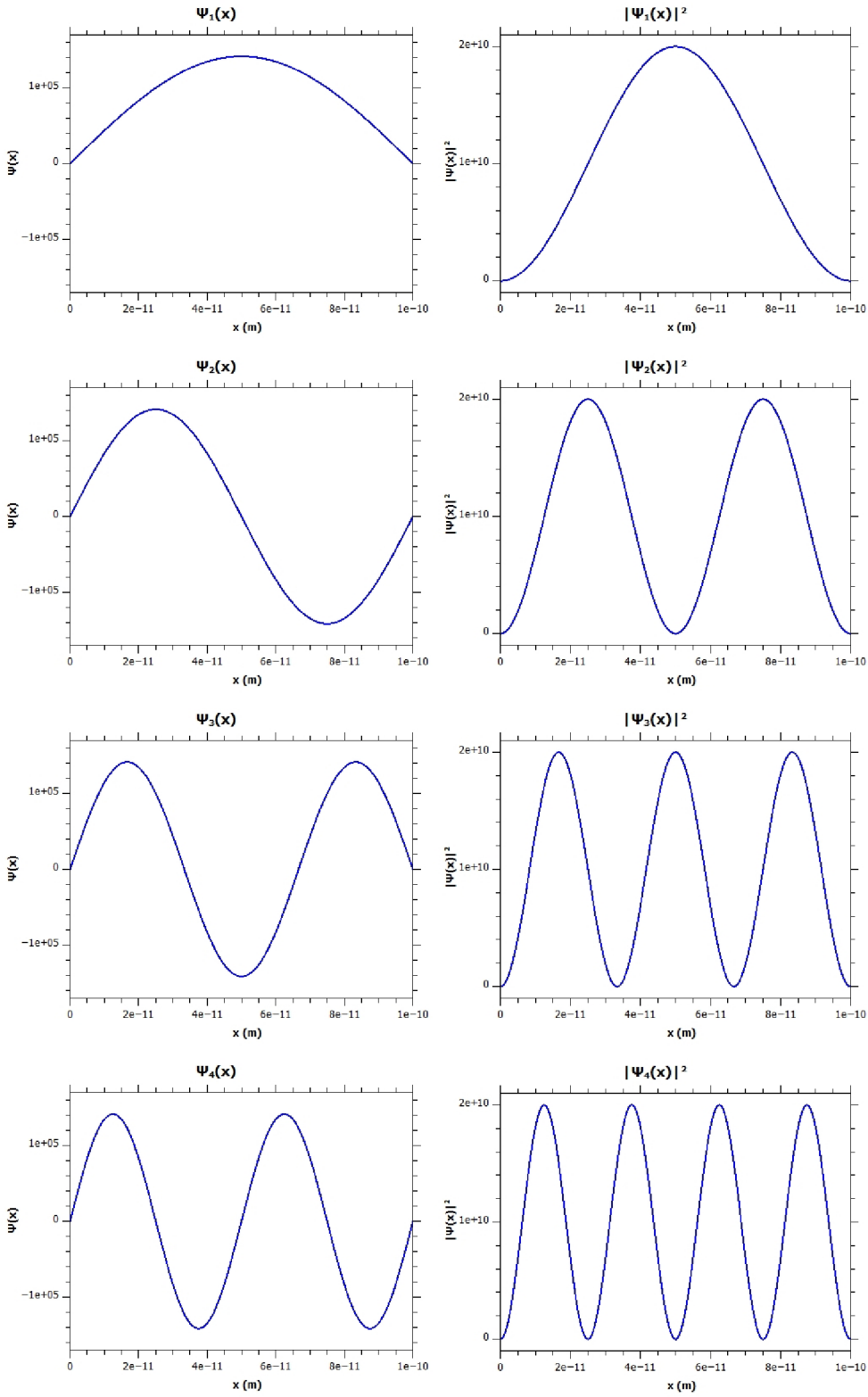
$$\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right)$$

V tomto případě víme, že kvantové číslo je $n = 1$ a šířka nekonečně hluboké potenciálové jámy je $L = 10^{-10}$ m. Nyní bude naším úkolem určit, kde v jámě se částice nachází. To mi, ale nejsme schopni zjistit. Stejně jako, když házíme kostkou. Nevíme jaké nám padne číslo. Vzpomeňte si na příklad házení se dvěma kostkami a pravděpodobnostní charakter. Ze znalosti vlnové funkce jsme schopni zjistit hustotu pravděpodobnosti vztahem:

$$\rho = |\Psi|^2 = \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{\pi n}{L}x\right)$$

Vidíme, že naším výsledkem je rozložení hustoty pravděpodobnosti na různých místech jámy. V předchozí kapitole jsme se seznamovali kromě řešení schrodingerovi rovnice i s tím, jak se liší diskrétní a spojité rozložení hodnot. Hustota pravděpodobnosti v závislosti

na poloze v jámě je spojité rozložení hodnot. Nyní si ukážeme dva typy grafů. Napravo jsou grafy hustoty pravděpodobnosti v závislosti na poloze pro první čtyři hodnoty kvantového čísla a grafy nalevo jsou grafy vlnových funkcí.



Obrázek 3.4: Vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti pro nekonečně hlubokou jámu

Na tomto místě si ještě ukážeme, jak spočítat pravděpodobnost nalezení částice v konkrétní části jámy. Pokuste se nejprve tyto pravděpodobnosti odhadnout na základě grafů až poté je spočítejte integrálem. Př.1 Spočítejte jaká je pravděpodobnost, že se částice nachází v první polovině jámy, pokud je kvantové číslo $n = 1$.

Z prvního grafu napravo je vidět, že funkce je symetrická kolem poloviny jámy a tudíž je pravděpodobnost nalezení v polovině jámy 50 %. Stejnou skutečnost jsme schopni dokázat řešením integrálu.

$$P = \int_0^{L/2} |\Psi(x)|^2 \mathrm{d}x = \int_0^{L/2} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \mathrm{d}x$$

Tento integrál jsme již řešili při normování vlnové funkce a uvádíme proto pouze jeho výsledek:

$$P = \int_0^{L/2} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \mathrm{d}x = \frac{2}{L}\frac{L}{n\pi}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\pi n}{L}x - \frac{\sin(2n\pi x/L)}{2}\right)\right]_0^{L/2}$$

Po dopočítání mezí integrálu a dosazení kvantového čísla n = 1 dostáváme pravděpodobnost 50 %, jak jsme odhadli z grafu funkce.

$$P = \frac{2}{L}\frac{L}{n\pi}\left(\frac{1}{2}\frac{\pi n}{L}\frac{L}{2} - 0\right) = 0,5$$

Př. 2: Spočítejte pravděpodobnost, že částici nalezneme v první třetině jámy pro $n = 1$.

Opět se podíváme na graf a vidíme, že v krajní třetině je pravděpodobnost nižší než ve třetině prostřední. Z obrázku lze jen konstatovat, že poslední třetina a první třetina mají stejnou pravděpodobnost (funkce je symetrická kolem poloviny jámy). Z obrázku můžeme např. hádat, že pravděpodobnost nalezení v první třetině bude menší než 33 %. Nyní už můžeme řešit integrálem. Provedeme to stejně jako v předchozím případě a dostáváme:

$$P = \int_0^{L/3} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \mathrm{d}x$$

$$P = \frac{2}{L}\frac{L}{n\pi}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\pi n}{L}x - \frac{\sin(2n\pi x/L)}{2}\right)\right]_0^{L/3}$$

$$P = \frac{2}{L}\frac{L}{\pi}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{L}\frac{L}{3} - \frac{\sin(2\pi/3)}{2}\right)\right]$$

$$P = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \sim 5,8\ \%$$

Př. 3: Spočítejte jaká je pravděpodobnost že částici nalezneme v prostřední části jámy za stavu, kdy $n = 1$.

Z obrázku jsme schopni pouze zjistit, že pravděpodobnost bude větší než 33 % (krajní části budou určitě menší než 66 %, protože obě krajní části jsou stejné a zároveň nižší než každá z nich je nižší než 33 %). Výpočet bychom mohli opět dělat pomocí integrálu, ale

v tomto případě můžeme využít předchozího výsledku a spočítat tuto pravděpodobnost ze znalosti, že víme, že všechny pravděpodobnosti musí dát dohromady jedničku (tedy 100 %).

$$P_1 + P_2 + P_3 = 1$$

Kde P_1 představuje pravděpodobnost že je částice v první třetině jámy. P_2 je pravděpodobnost, že je částice v prostřední části jámy a P_3 je pravděpodobnost, že je částice v poslední třetině jámy, přičemž platí $P_1 = P_3$.

$$P_2 = 1 - 2P_1 = 1 - 2\left(\frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{2\pi}\right) = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{\pi} \sim 88,5\%$$

Nyní si ještě zkusíme jeden příklad, ve kterém nebude kvantové číslo $n = 1$.

Př.4 Vypočítejte jaká je pravděpodobnost, že nalezneme částici v první šestině jámy, pokud je kvantové číslo n = 3.

Z grafu je vidět, že funkce je symetricky rozdělená na 6 stejných částí. Z toho lze jednoduše usoudit, že pravděpodobnost nalezení částice v první šestině jámy je 1/6 = 16,6 %. Tuto skutečnost si opět ověříme řešení integrálu. Nezapomeňme, že za kvantové číslo se tentokrát dosazuje n =3.

$$P = \int_0^{L/6} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \mathrm{d}x$$

$$P = \frac{2}{L}\frac{L}{n\pi}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\pi n}{L}x - \frac{\sin(2n\pi x/L)}{2}\right)\right]_0^{L/6}$$

$$P = \frac{2}{L}\frac{L}{3\pi}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{L}\frac{L}{6} - \frac{\sin(6\pi L/6L)}{2}\right)\right]$$

$$P = \frac{1}{6} - \frac{\sin(\pi)}{6\pi} = \frac{1}{6} - 0 \sim 16,6\ \%$$

Opět vidíme, že nám vyšla pravděpodobnost 16,6 % stejně jako, když jsme to řešili odhadem z grafu.

Na závěr této kapitoly si pouze připomeneme tabulkou, jak se liší charakter klasické a kvantové mechaniky ohledně pravděpodobnostního charakteru.
Tato podkapitola byla inspirována texty: [3][4][11].

Tabulka 3.5: Srovnání klasické a kvantové mechaniky v určování polohy těles

	určení polohy
klasická mechanika	pokud máme všechny potřebné informace (polohu a rychlost) o tělese a silách na něj působících, jsme schopni s jistotou (100% pravděpodobností) určit jakou polohu těleso má
kvantová mechanika	pokud máme všechny potřebné informace (vlnovou funkci) o mikročástici a o silových polích se kterými interaguje, jsme schopní určit ”pouze”hustotu pravděpodobnosti nalezení této částice ve vybrané poloze

Kapitola 4

Atom vodíku

4.1 Schrödingerova rovnice pro atom vodíku

V této kapitole se seznámíme se řešením Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku a ionty typu vodíku, tedy pro ionty s jedním elektronem. (Ionty typu vodíku jsou tím pádem např. He^+ (2 protony, 1 elektron), Li^{2+} (3 protony, 1 elektron) a další.) Dále uveďme, že klíčové pojmy, které je nutné v této kapitole uvést jsou kvantová čísla a vlnové funkce iontu typu vodíku, které nazveme orbitaly. Poté již budeme s těmito pojmy pouze pracovat a vysvětlovat praktické důsledky.

Vyjděme z podobné rovnice jako v případě nekonečně hluboké potenciálové jámy, ze stacionární Schrödingerovy rovnice:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)E_p(x,y,z)\right]\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z) \tag{4.1}$$

kde $\partial/\partial x$ je tzv. parciální derivace podle x, jedná se o úplně obyčejnou derivaci podle x, při které akorát derivujeme funkci více proměnných a při samotném provádění derivace se ke všem proměnným kromě x chováme jako ke konstantě. Analogicky $\partial/\partial y$ a $\partial/\partial z$ jsou parciální derivace podle y a z.

Na rozdíl od Schrödingerovy rovnice pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu se ta pro elektron v atomu především ve dvou věcech: První z nich je skutečnost, že potenciální energie je v tomto případě dána vztahem:

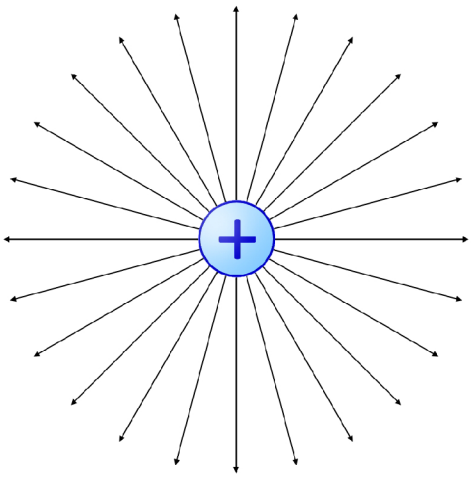
$$E_p=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q_1Q_2}{r} \tag{4.2}$$

Ve vzorci r je vzdálenost mezi náboji, Q_1 a Q_2 je velikost těchto nábojů a ε_0 je konstanta, tzv. permitivita vakua, jejíž hodnota v jednotkách SI je $8,854.10^{-12}$.

Jedná se o vzorec, se kterým se mohl čtenář setkat už při studiu elektřiny a magnetismu. Konkrétně v kapitole elektrostatika. Jedná se totiž o potenciální energii centrálního elektrického pole (viz obrázek 4.1). Pod pojmem centrální elektrické pole rozumíme stav, kdy v prostoru je umístěn bodový náboj a kolem něj vzniká elektrické pole. Jakmile vložíme do systému další náboj, tak tento vložený náboj interaguje s elektrickým polem. Vztah pro potenciální energii popisuje právě interakci tohoto pole s libovolnou nabitou částicí. Jádro atomu můžeme za takový bodový náboj považovat a potenciální energie pole kolem něj lze popsat právě vzorcem výše.

Pro iont typu vodíku budeme ale místo $Q_1 Q_2$ psát $-Ze^2$, kde Z je atomové číslo příslušného iontu a e je elementární náboj:

$$E_p = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \tag{4.3}$$



Obrázek 4.1: Centrální elektrické pole

Druhý rozdíl je vidět přímo ve Schrödingerově rovnici: rovnice neobsahuje pouze derivaci podle jedné souřadnice x, jako tomu bylo u naší nekonečně hluboké potenciálové jámy[1], ale podle tří souřadnic x, y, z. S touto skutečností také souvisí to, že vlnová funkce je závislá na všech souřadnicích tedy na x,y,z. Tuto závislost na třech souřadnicích matematicky zapisujeme takto:

$$\Psi(x,y,z) \tag{4.4}$$

Jakmile dosadíme do Schrödingerovy rovnice vzorec pro potenciál, dostáváme:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right]\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z) \tag{4.5}$$

Dále se v rovnici provede úprava, kdy místo souřadnic x, y, z dosadíme jiné souřadnice, r, φ, θ. Takovouto úpravu nazveme přechod od kartézských souřadnic k souřadnicím kulovým (sférickým):

- r je vzdálenost mezi počátkem souřadnic a zvoleným bodem
- θ je tzv. polární úhel (úhel mezi osou z a spojnicí počátku se zvoleným bodem)

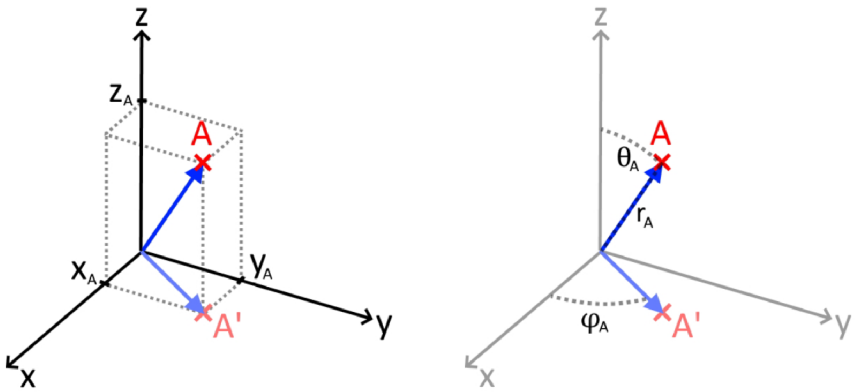
[1] I u nekonečně hluboké potenciálové jámy bychom se mohli setkat se třemi souřadnicemi, my jsme však pro jednoduchost zvolili jednorozměrnou jámu.

- φ je tzv. azimutální úhel (úhel mezi osou x a projekcí spojnice počátku se zvoleným bodem do roviny x-y)

Mezi těmito dvěma sadami souřadnic platí vztahy:

$$x = r\cos\varphi\sin\theta \tag{4.6}$$
$$y = r\sin\varphi\sin\theta \tag{4.7}$$
$$z = r\cos\theta \tag{4.8}$$

Na tomto místě ještě uveďme, že soustava souřadnic je pouze způsob, jak body v prostoru matematicky charakterizovat, a můžeme si zvolit takovou, jaká se nám zrovna hodí. Důvodem v tomto případě je mj. odmocnina ve jmenovateli potenciální energie, která by se špatně integrovala, v případě kulových souřadnic tuto odmocninu nahradíme r. Na obrázku 4.2 můžete vidět, že vybraný bod v prostoru může být jednoznačně charakterizován jak kartézskou soustavou souřadnic, tak kulovou soustavou souřadnic.



Obrázek 4.2: Bod v kartézské a sférické soustavě souřadnic

Napišme tedy stacionární Schrödingerovu rovnici pro atom vodíku ve sférických souřadnicích:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi}\right]-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi = E\Psi \tag{4.9}$$

Na první pohled se může zdát tato rovnice složitější než ta v kartézských souřadnicích, ale po úpravách vede na snadno integrovatelné vztahy. Řešení takové rovnice je však i tak nad rámec tohoto materiálu, takže zde jen uveďme některé vlastnosti řešení: Tou první je skutečnost, že vlnová funkce Ψ může být vyjádřena jako součin tří funkcí, přičemž první je závislá pouze na r, druhá je závislá pouze na φ a třetí je závislá pouze na θ. Tuto skutečnost zapisujeme matematicky jako:

$$\Psi(r,\varphi,\theta) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \tag{4.10}$$

Hladiny energie pro atom vodíku

Důležitou vlastností řešení je, že energie příslušných vlnových funkcí lze vyjádřit následujícím vztahem:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \sim -13,6\,\mathrm{eV}\,.\,\frac{1}{n^2} \tag{4.11}$$

Ještě uveďme, že toto rozložení vlnové funkce na součin tří funkcí lze provést pouze pro ionty typu vodíku. Toto rozložení je nutnou podmínkou k tomu, aby se Schrödingerova rovnice dala analyticky vyřešit. U všech složitějších atomů než ionty typu vodíku, např. už u helia nebo lithia, musíme k řešení Schrödingerovy rovnice použít nějaké přibližné metody. Nejčastěji se k těmto výpočtům používá výpočetní technika. My se zde budeme soustředit pouze na ionty typu vodíku.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [1][3][7][10][11][12][16].

4.2 Kvantová čísla - možné hodnoty

Jako první porovnejme kvantování u nekonečně hluboké potenciálové jámy a iontu typu vodíku. V předchozí kapitole bylo přesně matematicky vyřešeno, jak se kvantování objevilo u nekonečně hluboké potenciálové jámy. Řešením schrodingerovy rovnice je vlnová funkce, která má pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu tvar:

$$\Psi = Asin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Vidíme, že v této rovnici vystupuje jedno kvantové číslo n, které funguje jako parametr funkce Ψ. Z řešení rovnice vyplývá, že na toto číslo jsou kladené omezující podmínky. Toto číslo nemůže nabývat hodnot libovolných reálných čísel, ale že je omezeno na přirozená čísla.

Při řešení Schrödingerovy rovnice pro iont typu vodíku bude řešením vlnová funkce, kterou lze vyjádřit jako součin tří vlnových funkcí (první závislá na r, druhá na φ, třetí na $theta$). Po rozdělení na tyto tři funkce získáme ze Schrödingerovy rovnice tři jednodušší diferenciální rovnice, jejichž řešením budou konkrétní vlnové funkce. Při řešení těchto diferenciálních rovnic se objeví tři čísla, na která jsou kladeny specifické požadavky (podobně jako u nekonečně hluboké potenciálové to bylo jediné číslo n).

Tato tři čísla nazýváme kvantová čísla. Na následujících řádcích jsou vidět názvy těchto čísel a jejich značení.

- hlavní kvantové číslo n
- vedlejší kvantové číslo l
- magnetické kvantové číslo m

Tato čísla mají určitý význam, o kterém se dozvíte v podkapitole 4.2, v této fázi nás však bude zajímat jen o to, jak je značíme a jaké jsou na ně kladeny matematické požadavky. Znovu zopakujme, že existence kvantových čísel a požadavky na ně kladené. (Budou ukázány v následujícím odstavci plynou pouze z matematického řešení Schrödingerovy rovnice. Jsou tedy důsledkem řešení diferenciálních rovnic.) Nejprve se zaměříme na první dvě kvantová čísla.

Hlavní kvantové číslo (n) – Jeho hodnoty mohou nabývat pouze přirozených čísel. Hlavní kvantové číslo tedy může být: 1,2,3,4. . . .

Vedlejší kvantové číslo (l) – pro vedlejší kvantové číslo platí dvě podmínky:

- Jeho hodnoty mohou nabývat pouze přirozených čísel a nuly
- Jeho hodnota může být nejvýše n–1, kde n je hlavní kvantové číslo.

Tabulka 4.1 uvádí několik příkladů přípustných a nepřípustných dvojic hlavního a vedlejšího kvantového čísla.

Tabulka 4.1: Tabulka přípustných dvojic hlavního a vedlejšího kvantového čísla

hlavní kvantové číslo n	vedlejší kvantové číslo l
1	0
2	0 nebo 1
3	0 nebo 1 nebo 2
7	Vyhovuje 6 čísel: 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6

Věnujme se nyní třetímu kvantovému číslu.

Magnetické kvantové číslo (m) - pro magnetické kvantové číslo platí dvě podmínky:

- Jeho hodnoty mohou nabývat pouze celých čísel.
- Jeho hodnoty mohou být pouze z intervalu $(-l, l)$

V tabulce 4.3 si ukažme několik přípustných a nepřípustných kombinací vedlejšího a magnetického kvantového čísla.
Nyní porovnáme některé vlastnosti nekonečně hluboké potenciálové jámy a iontu typu vodíku.

Na závěr ještě zopakujme, že vlnová funkce určuje stav systému (tedy pokud známe vlnovou funkci jsme schopni o systému získat všechny relevantní informace, které nám kvantová mechanika může dát). Stejně jako $\Psi(x, y, z)$, tak $\Psi(r, \varphi, \theta)$ tedy určuje stav elektronu v atomu. Stav ale můžeme popsat i "pouze"trojicí uvedených kvantových čísel, protože tvar vlnové funkce je jimi úplně zadán. (Zde ještě poznamenejme, že lze napsat i

Tabulka 4.2: Tabulka nepřípustných kombinací hlavního a vedlejšího kvantového čísla

hlavní kvantové číslo n	vedlejší kvantové číslo l
1,5 hlavní kvantové číslo musí být přirozené číslo	0
0 hlavní kvantové číslo musí být přirozené číslo	0
2	2 vedlejší kvantové číslo může být nejvýše n-1, pokud je n = 2, pak může být nejvýše 1. Může tedy být pouze 0 nebo 1
5	6 vedlejší kvantové číslo může být nejvýše n-1, pokud je n = 5, pak může být nejvýše 4.

obecný tvar vlnové funkce s nedosazenými konkrétními parametry n, l, m, ale ten je poněkud složitý a vyjadřovat z něj je navíc nepraktické, protože vlnové funkce pro konkrétní hodnoty můžete dohledat v literatuře, např. [3][11] nebo na internetu.)

Zde ještě uveďme, že úplný stav elektronu neurčují tři, ale čtyři kvantová čísla, přičemž čtvrtým je tzv. magnetické spinové kvantové číslo m_s. Toto kvantové číslo nevyplývá ze Schrödingerovy rovnice, ale tzv. Diracovy rovnice. Ta je nad rámec tohoto textu, a tak se jí ani magnetickým spinovým kvantovým číslem nebudeme dále zabývat.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [3][7][10][11][12][21].

4.3 Význam kvantových čísel

Než, však budeme diskutovat fyzikální a chemický význam kvantových čísel je potřeba se seznámit s veličinou **moment hybnosti**. Začneme tedy tím, že se seznámíme s veličinou moment hybnosti. Tato veličina je známá již z klasické mechaniky, proto je možné, že už ji znáte. I pokud už tuto fyzikální veličinu z hodin fyziky z klasické mechaniky znáte doporučuji si tuto část přečíst a připomenout si některé její důležité použití.

Jak již bylo řečeno jedná se o fyzikální veličinu klasické mechaniky. Není to tedy veličina, která by se objevovala speciálně až v kvantové mechanice jako např. vlnová funkce. Nejprve si ukážeme definici momentu hybnosti:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{4.12}$$

Tabulka 4.3: Tabulka přípustných kombinací hlavního, vedlejšího a magnetického kvantového čísla.

hlavní kvantové číslo n	vedlejší kvantové číslo l	magnetické kvantové číslo m
1	0	0
2	0	0
	1	-1, 0 ,1
3	0	0
	1	-1, 0 ,1
	2	-2, -1, 0, 1, 2

Tabulka 4.4: Tabulka přípustných a nepřípustných kombinací hlavního a vedlejšího kvantového čísla

hlavní kvantové číslo n	vedlejší kvantové číslo l	magnetické kvantové číslo m
1	0	0
2	0	1 magnetické kvantové číslo může v tomto případě nabývat pouze hodnoty 0
4	2	3 magnetické kvantové číslo může v tomto případě nabývat pouze hodnot -2,-1,0,1,2

kde $\vec{L}$ je moment hybnosti, $\vec{r}$ je polohový vektor a $\vec{p}$ je hybnost. Mezi veličinami je vektorové a znaménko $\times$, které znamená vektorový součin. Pokud tento termín znáte z analytické geometrie ve třech rozměrech, tak vám stačí pouze sdělit, že ve fyzice se s tímto operátorem pracuje, tak jak jste zvyklí z matematiky. Pokud jste o tomto matematickém pojmu nikdy neslyšeli, tak vám nyní řeknu, co potřebujete vědět, abyste znali některé jeho vlastnosti, které budeme dále potřebovat. Vektor, který vznikne vektorovým součinem má velikost rovnu součinu velikostí vektorů, ze kterých vzniká, a sinu úhlu, který svírají, v našem případě:

$$L = rp\sin\alpha \tag{4.13}$$

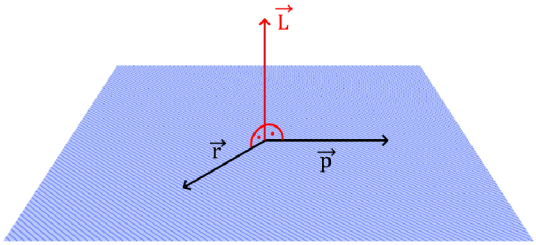
kde α je úhel, který spolu svírají polohový vektor a vektor hybnosti.

Další informaci, kterou potřebujete o tomto vektoru vědět je jeho směr. Směr vektoru bude kolmý na směry obou vektorů, ze kterých vzniká, tedy pro nás $\vec{L} \perp \vec{r}$ a $\vec{L} \perp \vec{p}$. Pro

Tabulka 4.5: Potenciálová jáma vs. iont typu vodíku (srovnání)

	nekonečně hluboká potenciálová jáma	iont typu vodíku (centrální pole)
vlnová funkce	vlnová funkce je závislá pouze na jedné souřadnici x, zapisujeme $\Psi(x)$	vlnová funkce je závislá na třech souřadnicích r, φ, θ, zapisujeme $\Psi(r, \varphi, \theta)$
počet diferenciálních rovnic	1 (viz kapitola 2)	3
kvantová čísla	1	3 (n, l, m)
podmínky kladené na kvantová čísla	kvantové číslo (n) musí být celým číslem	n musí být přirozeným číslem l může být pouze celé číslo mezi hodnotami 0 a $n-1$ m může být pouze celé číslo mezi hodnotami $-l$ a l

představu si můžete vzít do ruky dvě špejle, které budou představovat vektor polohy a hybnosti. Do jejich roviny vložíte papír. Tento papír bude představovat rovinu, na kterou je kolmý vektor momentu hybnosti. Více je vidět na následujícím obrázku.

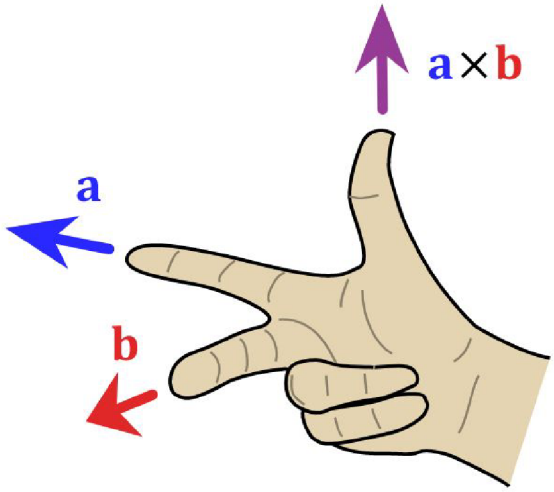


Obrázek 4.3: Směr vektorového součinu

Ještě je třeba sdělit, že vektorový součin není obecně komutativní (záleží na pořadí veličin ve vektorovém součinu) tedy neplatí:

$$\vec{r} \times \vec{p} \neq \vec{p} \times \vec{r}$$

Přemýšlivý čtenář si mohl všimnout, že předcházející definici vyhovují dva vektory, které jsou stejně velké a opačně orientované. V tom, který z nich je ten správný nám pomůže pořadí veličin ve vektorovém součinu. Vidíme, že ve vektorovém součinu je prvním napsaný polohový vektor (tato skutečnost je důležitá právě díky tomu, že vektorový součin není komutativní). Pokud chceme určit směr vektorového součinu je třeba využít pravidlo pravé ruky a to, tak že prsty budou směřovat od vektoru polohy k vektoru hybnosti a palec nám ukáže směr vektoru momentu hybnosti. Tato skutečnost je vidět na následujícím obrázku. (Pro upřesnění pouze uveďme, že je samozřejmě v pořádku počítat směr vektorového součinu pomocí jejich jednotlivých složek, tak jak se to učí v matematice.)



Obrázek 4.4: Pravidlo pravé ruky

Nyní když jsme si řekli, co je to vektor momentu hybnosti a nyní si ukážeme k čemu může znalost tohoto vektoru dobrá. Porovnáme spolu dva vztahy a to konkrétně vztah pro sílu (2. Newtonův zákon) a vztah pro moment síly.

$$\vec{F} = \frac{\mathrm{d}\vec{p}}{\mathrm{d}t}$$
$$\vec{M} = \frac{\mathrm{d}\vec{L}}{\mathrm{d}t}$$

Než tyto dva vztahy půjdeme vysvětlit uděláme si malé okénko do klasické mechaniky. Většinou nás zajímají případy, kdy jsou tělesa (částice) v rovnováze. Nyní si zopakujme podmínky nutné, které je třeba splnit, aby bylo těleso v rovnováze.

Obecně lze pohyb rozdělit na dva základní případy, pohyb posuvný (translační) a pohyb otáčivý (rotační). Nutná podmínka rovnováhy při posuvném pohybu je, že součet všech sil na těleso působící je roven nule. (Tato formulace vychází z 1. Newtonova zákona a pokud ji neznáte, doporučujeme si opět připomenout učebnice mechaniky). Matematicky zapíšeme takto.

$$\vec{F}_1 + \vec{F}_2 + \ldots + \vec{F}_N = 0$$

Nutná podmínka toho, že se těleso nepohybuje otáčivým pohybem je, že součet všech momentů sil na těleso je roven nule. (Tuto skutečnost také znáte z mechaniky a vychází z momentové věty a byla často používána u jednoduchých strojů v kapitole mechanika tuhého tělesa. Opět, pokud si již na toto tvrzení nevzpomínáte doporučuji si zopakovat z učebnice mechaniky). Matematicky zapíšeme takto.

$$\vec{M}_1 + \vec{M}_2 + \ldots + \vec{M}_N = 0$$

Pokud má být první derivace nějaké fyzikální veličiny podle času nulová, je nutné aby se tato veličina z časem neměnila. Dostáváme tedy dva vztahy, které vyjadřují že podmínka nutná k tomu, aby se těleso nepohybovalo je časová neměnnost hybnosti a momentu hybnosti. Tato pravidla známe pod názvem Zákon zachování hybnosti a zákon zachování momentu hybnosti:

$$\frac{\mathrm{d}\vec{p}}{\mathrm{d}t} = 0 \Rightarrow \vec{p} = \text{konst.}$$
$$\frac{\mathrm{d}\vec{L}}{\mathrm{d}t} = 0 \Rightarrow \vec{L} = \text{konst.}$$

Stejně jako se zákon zachování hybnosti uplatňoval u některých příkladů z mechaniky hmotného bodu (např. zpětný ráz pušky), tak se zákon zachování momentu hybnosti může uplatnit v některých náročnějších příkladů týkající se tuhého tělesa. (Tuhé těleso je model, které povoluje kromě posuvného pohybu i pohyb otáčivý, nikoliv však deformaci.)

Nyní, když jsme si vysvětlili, co je moment hybnost a nastínili k čemu by mohl být dobrý přejdeme již k vlastnímu vysvětlování kvantových čísel. Nejprve začneme hlavním kvantovým číslem.

Hlavní kvantové číslo

Pokud bychom si představili, že se na elektron v atomu nebudeme dívat pomocí kvantové mechaniky, ale podle klasické fyziky (samozřejmě klasická fyzika nepopíše správně chování elektronu) získali bychom jistou podobnost mezi pohybu elektronu v potenciálu jádra a mezi pohybu planet v potenciálu slunce. Rozdíl v tomto případě je pouze v tom, že na elektron působí elektrická síla a na planetu síla gravitační.

O chování planet víme, že se při jejím pohybu kolem slunce zachovávají dvě důležité fyzikální veličiny celková energie a moment hybnosti. Pro planetu pohybující se kolem slunce platí, že její energie může být libovolná jen se nesmí s časem měnit. Pro elektron platí stejně tak, že se energie musí zachovávat (pokud na atom nepůsobí nějaké okolní síly), ale rozdíl je v tom, že energie nemůže být libovolná, ale závisí na kvantovém čísle vztahem:

$$E = \frac{me^4}{8h^2\varepsilon_0^2 n^2}$$

kde E je energie, n hlavní kvantové číslo, $\hbar$ redukovaná Planckova konstanta, ε_0 je permitivita vakua (konstanta), m je hmotnost elektronu (konstanta) a e je elementární náboj (konstanta). Pokud tedy ve vztahu pro energii vyčíslíme konstanty dostáváme vztah:

$$E = -13,6\,\mathrm{eV}.\frac{1}{n^2}$$

Pokud bychom tedy měli shrnout jaký význam má hlavní kvantové číslo, řekli bychom, že určuje energii elektronu v atomu.

Vedlejší kvantové číslo

Stejně jako u pohybu planet kolem Slunce, kde se zachovává celková energie a moment hybnosti se i u elektronu v atomu zachovává moment hybnosti a energie. Energie jsme řekli, že závisí na hlavním kvantovém čísle. Tak vedlejší kvantové číslo nám řekne druhou důležitou informaci, a to o momentu hybnosti. Konkrétně o velikosti vektoru momentu hybnosti. Pro připomenutí uvádíme, že vektor momentu hybnosti má tři složky (v trojrozměrném prostoru) a jeho velikost se spočte jako:

$$L = \sqrt{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2} \tag{4.14}$$

kde L je velikost momentu hybnosti, L_x je průmět momentu hybnosti do osy x, L_y je průmět momentu hybnosti do osy y a L_z je průmět momentu hybnosti do osy z. Velikost momentu hybnosti L je s vedlejším kvantovým číslem l spojena vztahem:

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \tag{4.15}$$

$\hbar$ je opět redukovaná Planckova konstanta. Nyní si spočítáme velikosti momentu hybnosti pro kvantová čísla $l = 0$, $l = 1$ a $l = 2$.

$$\begin{aligned} L_{l=0} &= \hbar\sqrt{0(0+1)} = 0 \\ L_{l=1} &= \hbar\sqrt{1(1+1)} = \hbar\sqrt{2} \\ L_{l=2} &= \hbar\sqrt{2(2+1)} = \hbar\sqrt{6} \end{aligned}$$

Z výpočtů a rovnice je vidět, že pouze pro vedlejší kvantové číslo $l = 0$ je velikost momentu hybnosti rovna nule. Na tomto místě jen poznamenejme, že vedlejší kvantové číslo nám nic neříká o jednotlivých složkách momentu hybnosti, ale pouze o jeho velikosti. Nyní je na čase se seznámit s poslední kvantovým číslem a to konkrétně magnetickým kvantovým číslem.

Magnetické kvantové číslo

Nyní už jsme už víme, že vedlejší kvantové číslo nám popisuje velikost momentu hybnosti. Magnetické kvantové číslo nám sdělí jaká je z-složka momentu hybnosti (L_z). Magnetické kvantové číslo je se z-složkou momentu hybnosti spojeno vztahem:

$$L_z = m\hbar \tag{4.16}$$

Dále ještě uveďme, že nejsme schopni současně změřit všechny složky momentu hybnosti. Jsme schopni změřit pouze jedinou složku. My si vybíráme složku L_z.

Nakonec ještě ukážeme význam kvantových čísel na grafické znázornění pravděpodobnosti výskytu elektronu. Tento popis provedeme tabulkou. V tabulce Vám ukážeme přípustné a nepřípustné významy kvantových čísel na jejich grafické znázornění:

Tabulka 4.6: Přípustné a nepřípustné významy kvantových čísel

	přípustný význam kvantového čísla	nepřípustný význam kvantového čísla
hlavní kvantové číslo n	Určuje velikost oblasti, kde je určitá pravděpodobnost výskytu elektronu.	Určuje velikost orbitalu.
vedlejší kvantové číslo l	Určuje tvar oblasti, kde je určitá pravděpodobnost výskytu elektronu	Určuje tvar orbitalu.
magnetické kvantové číslo m	Určuje orientaci oblasti v prostoru, kde je určitá pravděpodobnost výskytu elektronu.	Určuje orientaci orbitalu v prostoru.

V této tabulce je pouze shrnutí významu kvantových čísel. Podrobnější vysvětlení o grafických znázornění orbitalů a správnou definici, co je to orbital naleznete až v následující kapitole.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [3][5][7][10][11][12][14][21].

4.4 Orbitaly

Nyní se začneme zajímat o konkrétní tvary vlnových funkcí. Na tomto místě znovu zopakujme, že vlnová funkce popisuje stav systému. Stavem systému rozumíme minimální informaci, kterou musíme znát, abychom aparátem dané disciplíny (kvantové mechaniky) dokázali získat všechny relevantní informace. Pokud dělá čtenáři problém pojem stav a vlnová funkce, odkazujeme ho na druhou kapitolu.

Nyní už je na čase říct, co je to orbital. **Orbital** je stav elektronu v atomu (nebo iontu, molekule). Je možné, že se nám tato definice nebude líbit. Pokud tomu tak je, můžeme také říct, že orbital je funkce, která popisuje elektron v atomu. V následující tabulce vám ukážeme přípustné definice orbitalu a také nepřípustné definice. Čtenář by se mohl divit, proč mu předkládáme ke čtení nesmyslné definice. Důvodem je to, že ve spoustě středoškolských (bohužel i v některých vysokoškolských) učebnic chemie se tyto naprosto nesmyslné formulace pojmu orbital objevují.

Obě chybné definice stojí vlastně na stejném chybném základu. Předpokládají, že orbital je prostor, ve kterém se elektron nejspíše vyskytuje, což je způsobeno tím, jak se orbitaly graficky znázorňují (viz další podkapitola), není to však pravda. Orbital není prostor, ve kterém se elektron vyskytuje, ale samotný stav elektronu (který určuje mimo jiné to, v jaké části prostoru se elektron nejspíše vyskytuje). Místo tvrzení, že se jedná o stav, můžeme také říct, že je to vlnová funkce elektronu v atomu.

Před tím, než si ukážeme příklady orbitalů v atomu vodíku, řekněme si ještě něco o jejich značení: Orbitaly jsou označené číslicí a malým písmenem. Hodnota číslice odpovídá

Tabulka 4.7: Přípustné a nepřípustné definice orbitalu

přípustná definice	nepřípustná definice
Orbital je stav elektronu v atomu (iontu).	Orbital je prostor, ve kterém se s předem danou pravděpodobností (většinou 95 %) elektron vyskytuje.
Orbital je vlnová funkce popisující rozložení hustoty elektrické náboje v atomu (iontu)	Orbital je místem s velkou pravděpodobností výskytu elektronu ve volném atomu netvořícím vazbu.

hlavnímu kvantovému číslu n a písmenko odpovídá vedlejšímu kvantovému číslu l a to tak, že písmena s, p, d, f znamenají popořadě $l = 1, 2, 3, 4$. Konkrétní příklady orbitalů lze nalézt v tabulce:

Tabulka 4.8: Některé příklady orbitalů v atomu a jejich pojmenování

hlavní kvantové číslo (n)	vedlejší kvantové číslo (l)	zápis orbitalu
1	0	1s
2	0	2s
2	1	2p
3	0	3s
3	1	3p
3	2	3d
4	3	4f

Nyní se podívejme na konkrétní příklady orbitalů. Uvažujme nejprve nejnižší stav, orbital 1s, který je popsán kvantovými čísly $n = 1$ a $l = 0$. Pro vodík má (jako vlnová funkce) tvar:

$$\Psi_{1s} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{4.17}$$

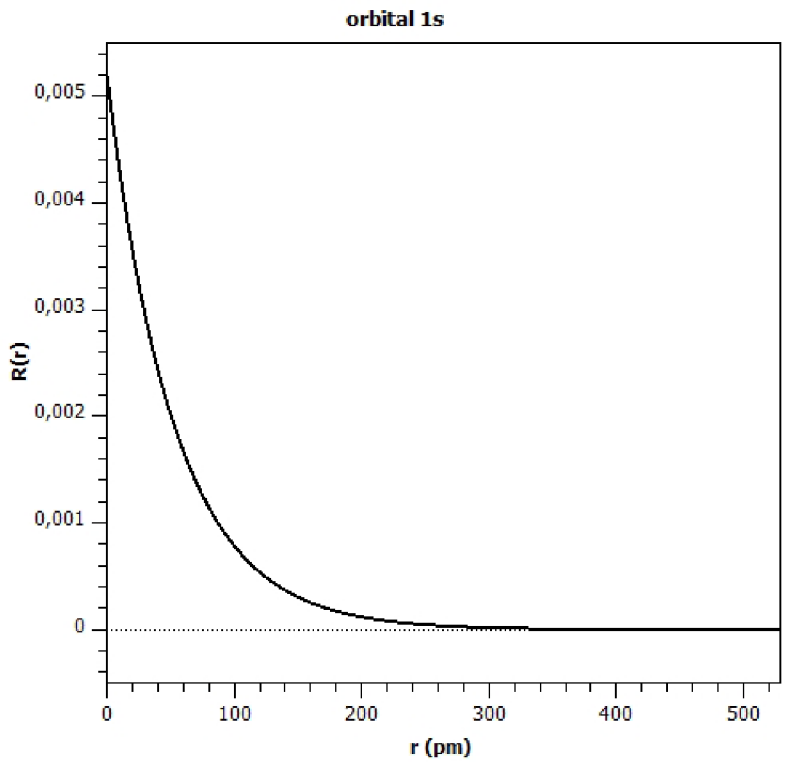
kde a_0 je konstanta, kterou nazýváme Bohrovým poloměrem, její hodnota je přibližně 0,0529 nm. (Už dopředu Vám můžeme prozradit, že se jedná o vzdálenost ve které je největší pravděpodobnost toho, že nalezneme elektron ve stavu 1s v atomu vodíku. Dále bude vysvětleno podrobněji.) Na tomto místě opět poznamenejme, že tuto funkci bychom získali řešením Schrödingerovy rovnice a následným dosazením $n = 1$ a $l = 0$). Nejedná se tedy o nic jiného než řešení matematické rovnice. Na tomto místě ještě ukážeme dvě

vlnové funkce, a to konkrétně pro orbital 2s a 2p. Pro úplnost uveďme, že vlnová funkce 2p je uváděna pro magnetické kvantové číslo $m = 0$.

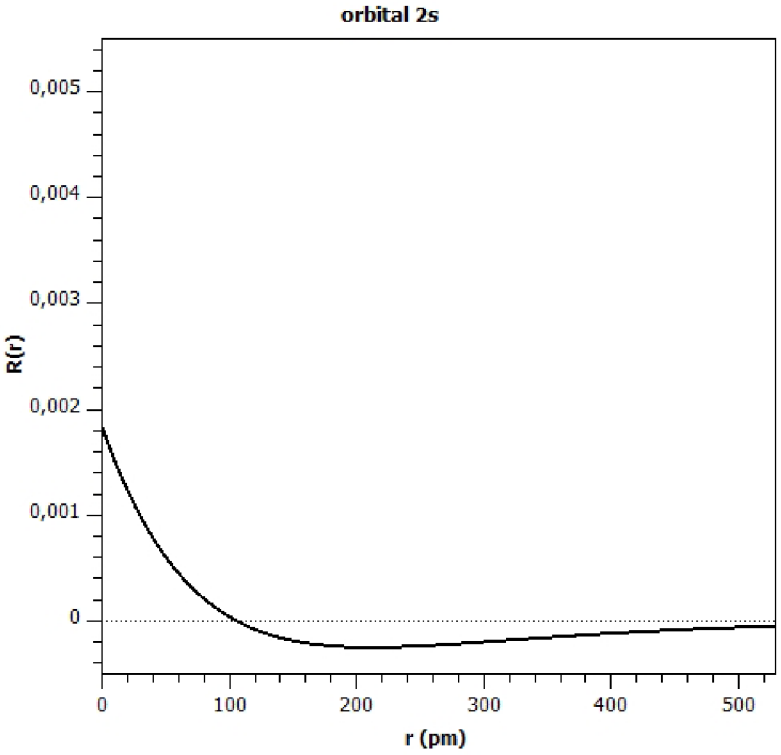
$$\Psi_{2s} = \frac{1}{2\sqrt{2a_0^3}}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{4.18}$$

$$\Psi_{2p} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}}\sin\theta \tag{4.19}$$

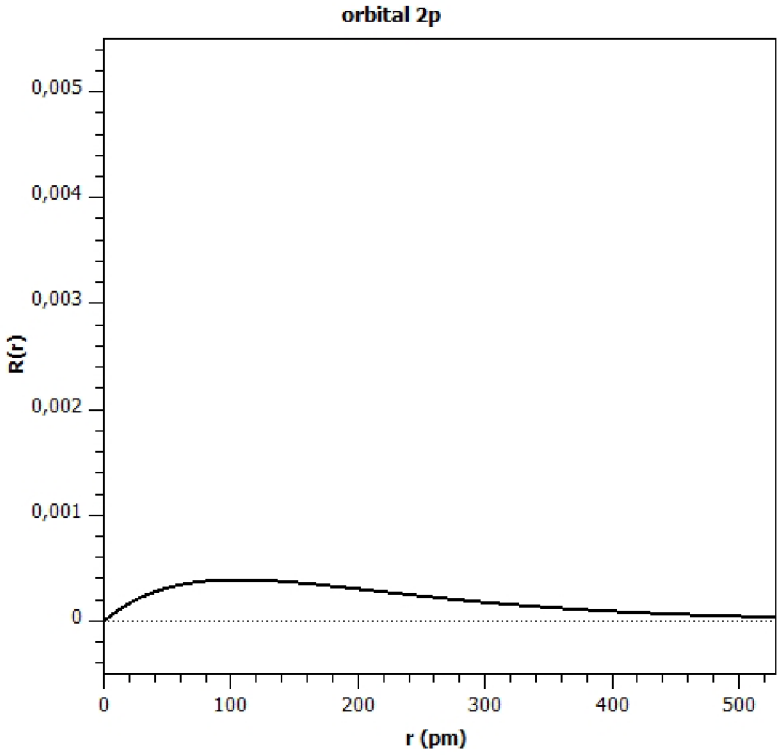
Čtenáři nabízíme na obrázku 4.3 ještě grafy, na kterých může vidět tyto vlnové funkce, resp. jejich část závislou na r ($R(r)$). Na vodorovnou osu je vynášena vzdálenost od jádra r, ve které zkoumáme hodnotu vlnové funkce. Na svislé ose je vynášena hodnota vlnové funkce.



Obrázek 4.5: Graf závislosti $R(r)$ (části vlnové funkce závislé na vzdálenosti od jádra) na vzdálenosti od jádra pro orbital 1s.



Obrázek 4.6: Graf závislosti $R(r)$ (části vlnové funkce závislé na vzdálenosti od jádra) na vzdálenosti od jádra pro orbital 2s.



Obrázek 4.7: Graf závislosti $R(r)$ (části vlnové funkce závislé na vzdálenosti od jádra) na vzdálenosti od jádra pro orbital 2p.

Hodnoty v tomto grafu ovšem nemají žádný význam. Jsou zde uvedeny pouze, proto aby čtenář tuto závislost viděl a bylo mu opět zopakováno, že vlnová funkce sice popisuje stav, ale jinak nemá žádnou konkrétní fyzikální ani chemickou interpretaci. Konkrétní interpretaci má až druhá mocnina absolutní hodnoty této vlnové funkce. Pro jednotlivé vlnové funkce (orbitaly 1s, 2s a 2p) vypisujeme druhou mocninu absolutní hodnoty vlnové funkce.

$$|\Psi_{1s}|^2 = \frac{4}{a_0^3} e^{\frac{2r}{a_0}} \frac{1}{4\pi}$$

$$|\Psi_{2s}|^2 = \frac{1}{8a_0^3} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{\frac{r}{a_0}} \frac{1}{4\pi}$$

$$|\Psi_{2p}|^2 = \frac{4}{a_0^3} e^{\frac{r}{a_0}} \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta$$

Stále připomínáme, že význam druhé mocniny z absolutní hodnoty vlnové funkce je hustota pravděpodobnosti nalezení částice v nějakém bodě prostoru.

Kdybychom tyhle funkce vykreslili v závislosti na r, bylo by vidět (a dá se to odhadnout z předchozích grafů), že maximální hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu je na jádře. Čtenář by na tomto místě měl dojít k rozporu. Problémem je to, že nalezení v bodě prostoru není to samé, jako nalezení v určité vzdálenosti (uvažujeme jednu souřadnici). Ta by totiž vypadala následovně:

$$\rho(r) = \frac{dP}{dr} \tag{4.20}$$

Při určování hustoty pravděpodobnosti nalezení částice v určité vzdálenosti od jádra (tzv. radiální hustoty pravděpodobnosti) bereme v potaz že se částice nachází v jednom z bodů nekonečně tenké kulové slupky o poloměru zvolené vzdálenosti od jádra.

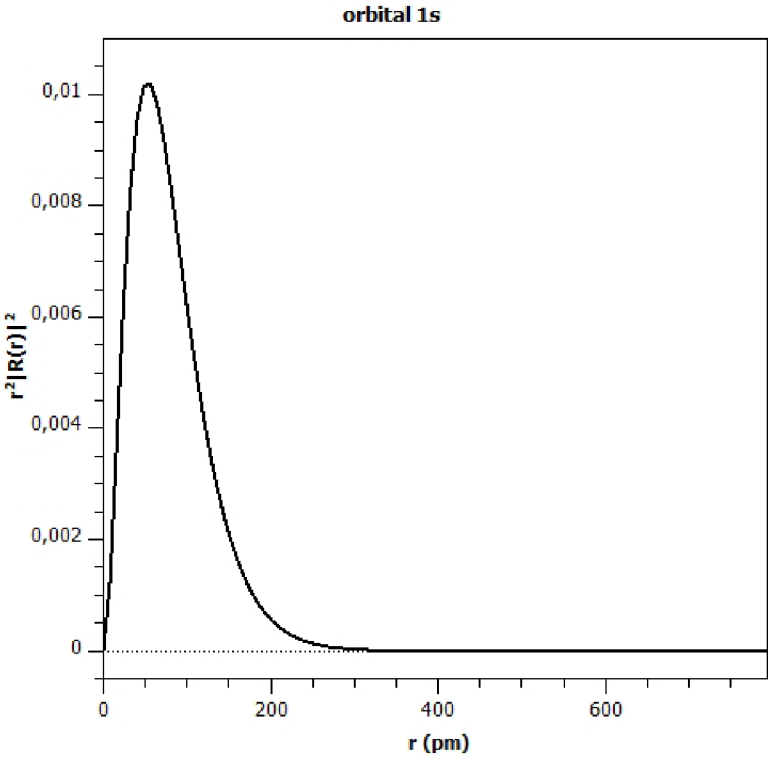
Pokud popisujeme objem nekonečně tenké kulové slupky dV je možné psát:

$$\mathrm{d}V = 4\pi r^2 . \mathrm{d}r \tag{4.21}$$

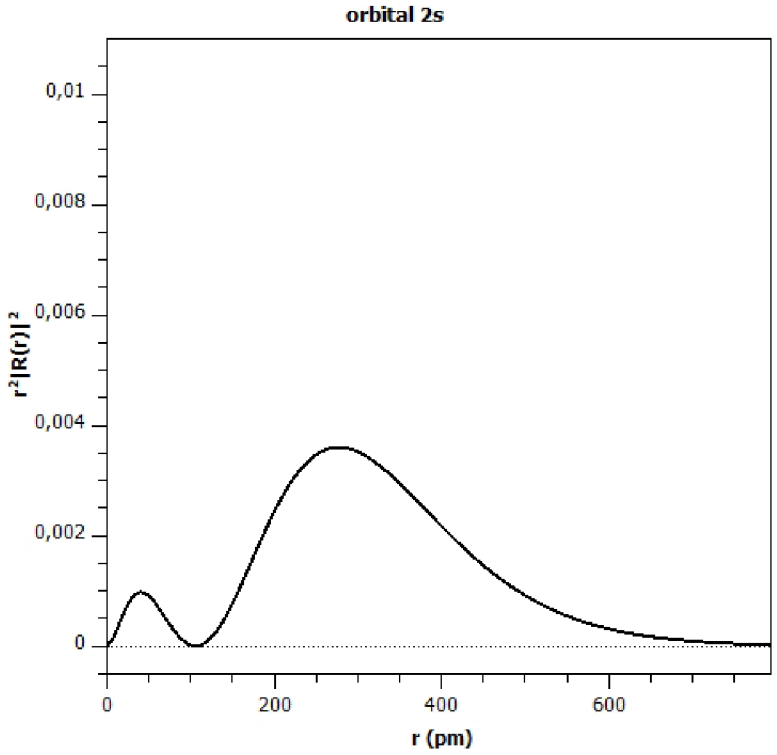
kde dr znamená diferenciál poloměru a r poloměr. Když tuto skutečnost dosadíme do rovnice (4.20), lze odvodit, že radiální hustota pravděpodobnosti (někdy také radiální distribuční funkci) je rovna:

$$\rho(r) = r^2 |R(r)|^2 \tag{4.22}$$

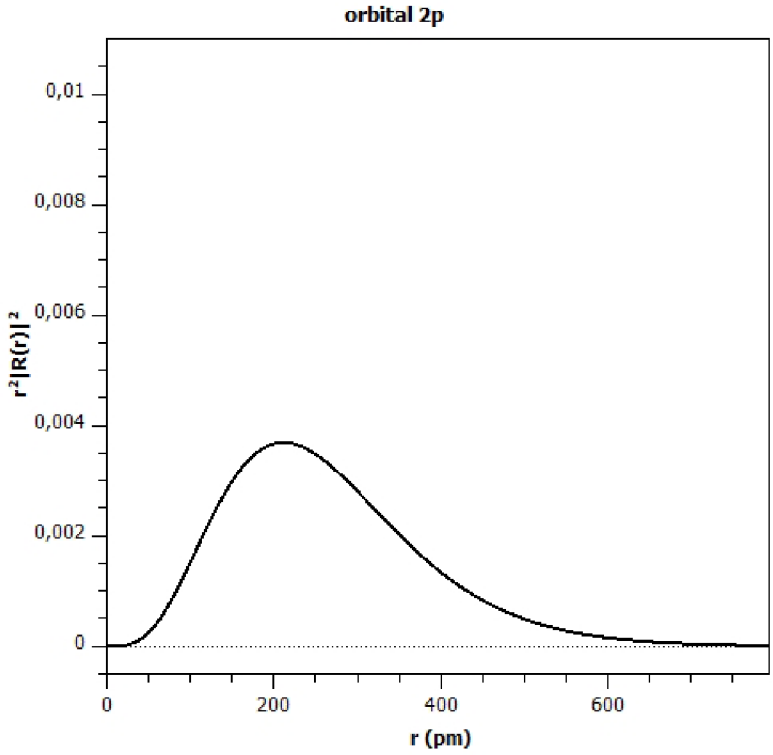
Toto je výraz, který udává hustotu pravděpodobnosti výskytu elektronu v určité vzdálenosti od jádra. Na následujících grafech je vynesena závislost této hustoty pravděpodobnosti na vzdálenosti r od jádra pro orbitaly 1s, 2s, 2p:



Obrázek 4.8: Hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v určité vzdálenosti od jádra pro orbital 1s



Obrázek 4.9: Hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v určité vzdálenosti od jádra pro orbital 2s



Obrázek 4.10: Hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v určité vzdálenosti od jádra pro orbital 2p

Toto jsou nejdůležitější grafy této podkapitoly a v několika následujících odstavcích s ním budeme pracovat. Jako první cvičení si zkusíme najít matematickým řešením pro jakou vzdálenost je největší pravděpodobnost nalezení elektronu v orbitalech 1s, 2s a 2p.

Naším úkolem je tedy nález maximum těchto funkcí. Nutnou podmínkou pro maximum je to, že je tam první derivace rovná nule. Na tomto místě uvádíme jednotlivé funkce zderivované a položené rovno nule.

Pro 1s:

$$\frac{\mathrm{d}|\Psi_{1s}|^2}{\mathrm{d}r} = 2r\frac{4}{a_0^3}e^{\frac{2r}{a_0}} - \frac{4r^2}{a_0^3}\frac{2}{a_0}e^{-\frac{2r}{a_0}} = 0$$

$$\frac{8r}{a_0^3} = \frac{8r^2}{a_0^4}$$

$$r = a_0$$

Pro 2s:

$$\frac{\mathrm{d}|\Psi_{2s}|^2}{\mathrm{d}r} = \frac{r}{4a_0^3}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0^2}} + \frac{r^2}{8a_0^3}\left(-\frac{4}{a_0}+\frac{2r}{a_0^2}\right)e^{-\frac{r}{a_0^2}} - \frac{r^2}{8a_0^4}\left(-\frac{4}{a_0}+\frac{2r}{a_0^2}\right)e^{-\frac{r}{a_0^2}} = 0$$

$$\dots$$

$$r^3 - 6r^2a_0 + 4ra_0^2 - 10a^3 = 0$$

$$r \sim 5,6a_0$$

Pro 2p:

$$\frac{\mathrm{d}|\Psi_{2p}|^2}{\mathrm{d}r} = \frac{4r^3}{24a_0^5}e^{-\frac{r}{a_0^2}} - \frac{1}{a_0}\frac{r^4}{24a_0^5}e^{-\frac{r}{a_0^2}} = 0$$

$$4r^3 = \frac{r^4}{a_0}$$

$$r = 4a$$

Vyřešením těchto rovnic získáváme hodnoty, ve kterých je největší pravděpodobnost nalézt elektron pro jednotlivé orbitaly. Za povšimnutí jistě stojí výsledek pro orbital 1s, který je přesně roven jednomu Bohrovu poloměru. Pro zajímavost uveďme, že Bohrův poloměr (52,9 pm) jako hodnota již vyšel i podle výsledků klasické fyziky.

Z těchto výpočtů i grafu závislosti radiální distribuční funkce na vzdálenosti je jasné, proč elektron obsazuje nejprve orbital 1s poté 2s a nakonec 2p. (Samozřejmě existují další orbitaly podle pravidel, které jsme uvedli v podkapitole o kvantových číslech). Zdůvodnění

je takové, že pro nižší hodnoty vzdálenosti od jádra má vyšší hodnotu radiální distribuční funkce pro orbital 1s nižší pro orbital 2s a nejnižší pro orbital 2p.

Dále si na tomto grafu spočítáme jak velká je pravděpodobnost, že nalezneme elektron ve vzdálenosti jednoho Bohrova poloměru od jádra a to konkrétně v orbitalu 1s. Nejprve si graficky ukážeme, co budeme počítat. Pokud chceme znát pravděpodobnost výskytu v určitých mezích je třeba zintegrovat radiální distribuční funkci. Integrál má význam plochy pod křivkou, proto tedy toto pravděpodobnost bude určena jako poměr plochy ležící pod funkcí v intervalu 0 až 1 Bohrův poloměr a celkové plochy pod grafem (tady ale bude 1, protože je funkce normovaná).

$$P = \int_0^{a_0} r^2 \frac{4}{a_0^3} e^{\frac{2r}{a_0}} \mathrm{d}r$$

Nyní si ještě tento integrál spočítáme.

$$P = \frac{4}{a_0^3}\left[r^2\left(-\frac{a}{2}\right)e^{\frac{2r}{a_0}}\right]_0^{a_0} - \frac{4}{a_0^3}\int_0^{a_0} 2r\left(-\frac{a}{2}\right)e^{\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r$$

$$P = -\frac{2}{a^2}\left[r^2 e^{\frac{2r}{a_0}}\right]_0^{a_0} + \frac{2}{a^2}\left[2r\left(-\frac{a}{2}\right)2e^{\frac{2r}{a_0}}\right]_0^{a_0} - \frac{2}{a_0^2}\int_0^{a_0} 2\left(-\frac{a_0}{2}\right)e^{\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r$$

$$P = -\frac{2}{a_0^2}\left[\left(r^2 + a_0 r + \frac{a_0^2}{2}\right)e^{\frac{2r}{a_0}}\right]_0^{a_0}$$

$$P = -\frac{2}{a_0^2}\left[\left(a_0^2 + a_0^2 + \frac{a_0^2}{2}\right)e^{-2} - \frac{a_0^2}{2}\right]$$

$$P = 1 - \frac{5}{e^2} \sim 32,3\,\%$$

Za povšimnutí jistě stojí to, že pravděpodobnost toho, že nalezneme elektron v mezích od jádra k jeho nejpravděpodobnější hodnotě je menší než 50 procent. Výsledky pravděpodobnosti pro orbital další orbitaly 2s a 2p jsou spolu s orbitalem 1s uvedeny v následující tabulce a to konkrétně pro hodnoty 0 – 4 Bohrovy poloměry

Tabulka 4.9: Pravděpodobnost nalezení elektronu ve vzdálenosti do $4a_0$ od jádra pro vybrané stavy

orbital	1s	2s	2p
pravděpodobnost výskytu v intervalu od 0 do $4a_0$	98,6 %	17,6 %	37,1 %

Na tomto místě znovu zopakujme některé poznatky (podivnosti z minulé kapitoly), které pro elektrony v orbitalech vodíku platí:

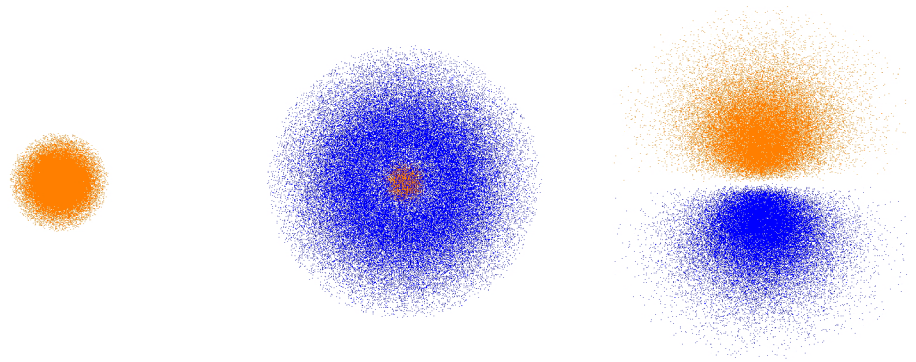
- Pokud je elektron v orbitalu (je vázán k atomu – není tedy volný) pak je jeho energie (i další veličiny ho popisující např. moment hybnosti) kvantované. Na následujícím již známém obrázku z minulé kapitoly si můžete prohlédnou energetické hladiny elektronu v atomu vodíku.
- Pokud je elektron v orbitalu (je vázán k atomu – není tedy volný), pak můžeme určit pouze určitou pravděpodobnost, kde se bude elektron na dané energetické hladině nacházet.

Pro danou energii nemůžeme nikdy s jistotou určit jeho přesnou polohu stejně jako tomu bylo i u nekonečně hluboké potenciálové jámy. Tuto skutečnosti jsme si dokonce ilustrovali předcházejícími výpočty.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [3][7][10][11][12][16].

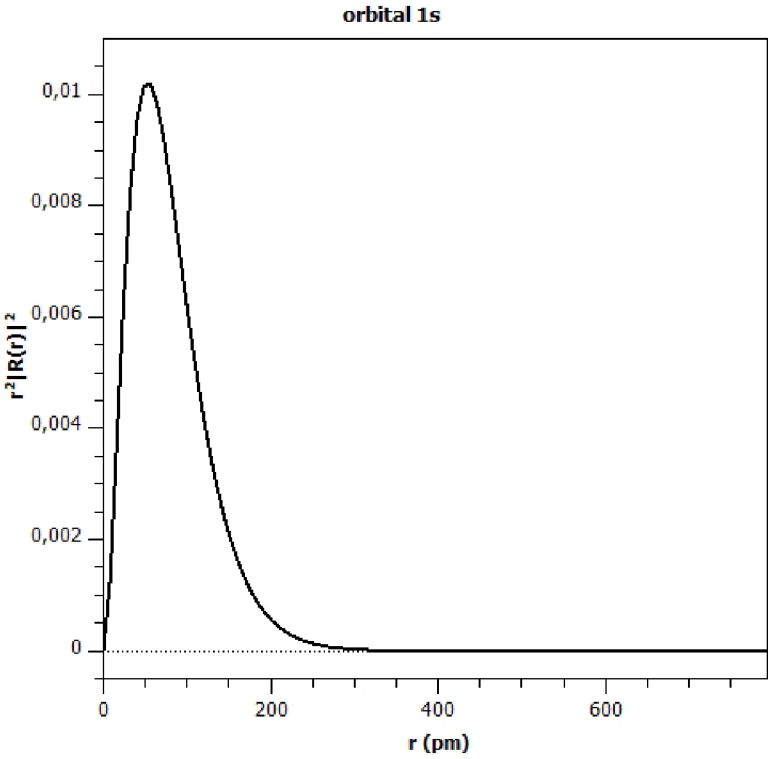
4.5 Grafické znázornění orbitalů

Nakonec se seznámíme z obrázky, které se běžně používají na znázornění orbitalů. Jelikož se někdy stává, že obrázky jsou nám známi, ale naše interpretace těchto obrázku je chybná, tak si společně ukážeme (stejně jako u pojmu orbital) přípustnou a nepřípustnou definici. Nejprve již slibované grafické znázornění 3 nejjednodušších orbitalů. Tedy orbitalu 1s, 2s a 2p. Budeme si ukazovat 2 typy obrázků a podrobně si je rozebereme.

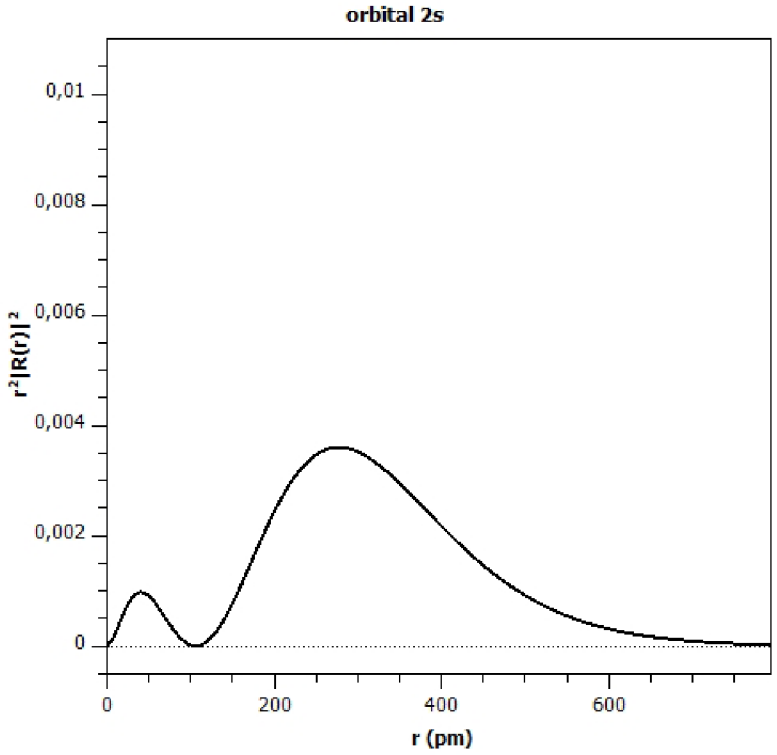


Obrázek 4.11: Znázornění orbitalů 1s, 2s a 2p

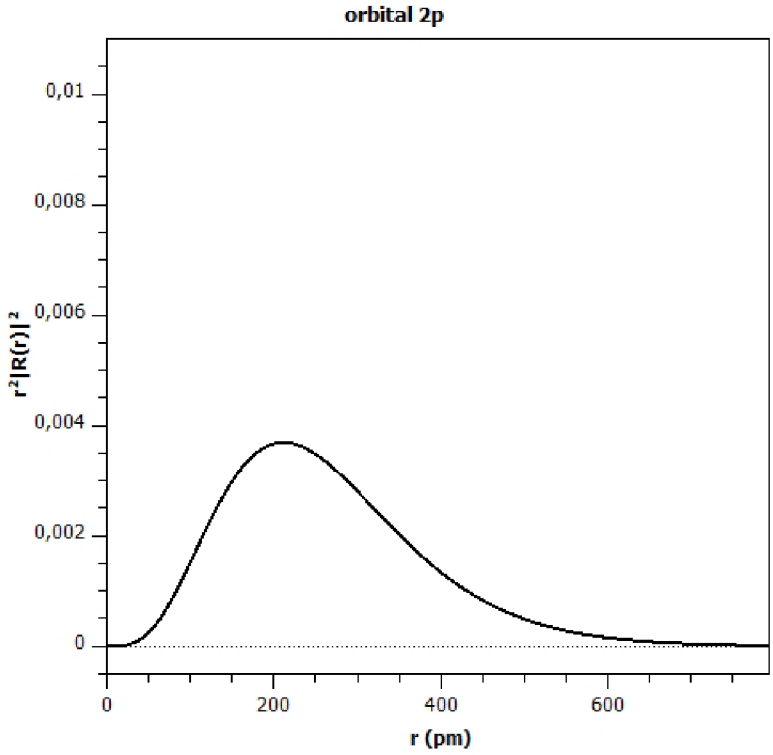
Tyto obrázky jsou znázorněním, kdy hustota bodů odpovídá hustotě pravděpodobnosti. V místech, kde je hodně bodů na jednom místě je i vysoká hustota pravděpodobnosti. Vidíme, že nejvíce bodů je kolem jádra a to přesně sedí s tím, že nejvyšší hustota pravděpodobnosti je kolem jádra (viz graf). Opět zde ukazujeme grafy závislosti hustoty pravděpodobnosti na vzdálenosti od jádra.



Obrázek 4.12: Hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v určité vzdálenosti od jádra pro orbital 1s

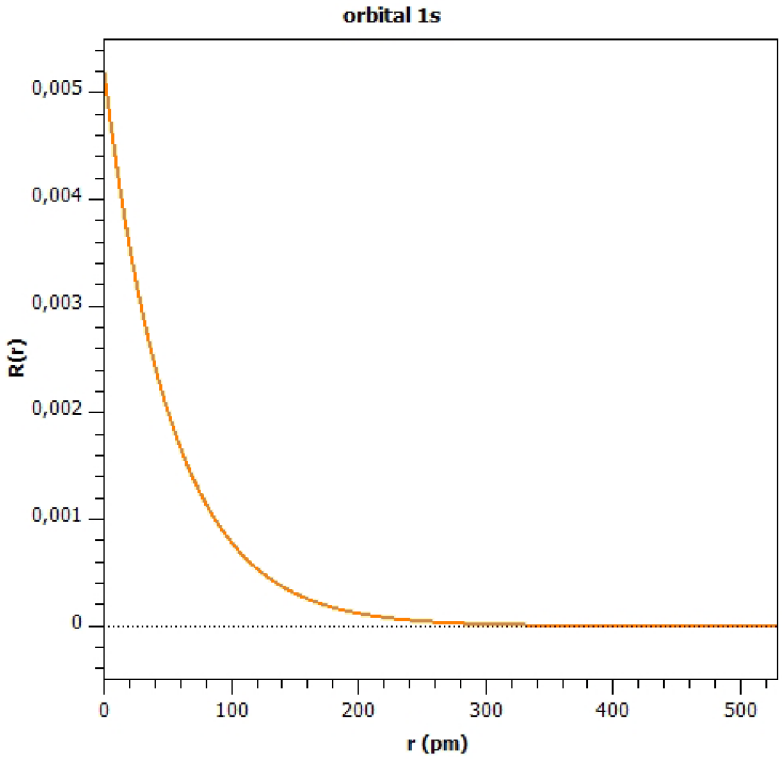


Obrázek 4.13: Hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v určité vzdálenosti od jádra pro orbital 2s

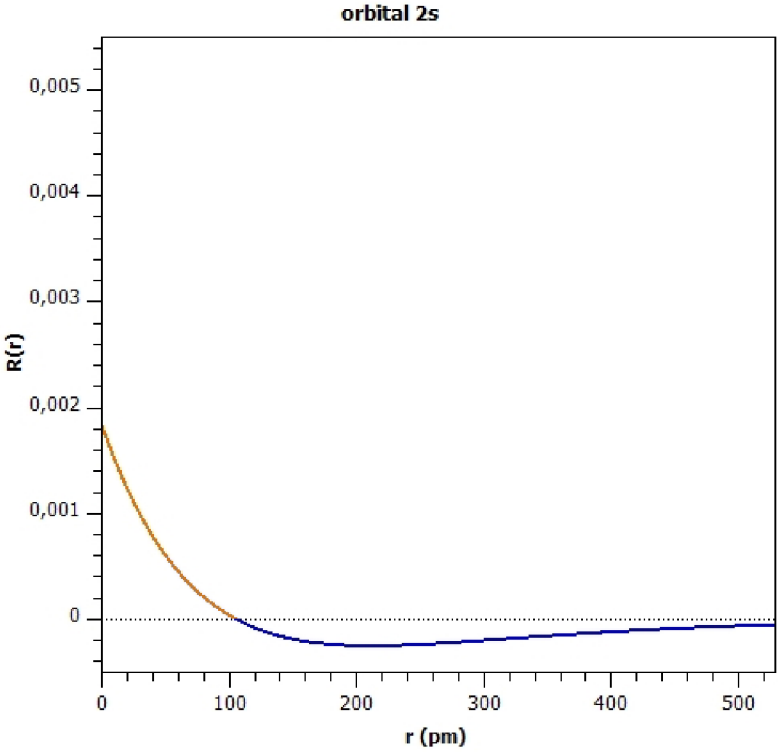


Obrázek 4.14: Hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v určité vzdálenosti od jádra pro orbital 2p

Barevné odlišení bodů souvisí s tím, jaké má znaménko vlnová funkce. Pokud je vlnová funkce kladná, pak body znázorňujeme modře, pokud je vlnová funkce záporná body znázorňujeme červeně. Zde jen připomínáme, že vlnová funkce nemá fyzikální význam. Pro připomenutí zde ještě jednou uvádíme graf závislosti vlnové funkce na vzdálenosti od jádra. Na tomto obrázku můžeme vidět, jak spolu souvisí grafické znázornění orbitalu a příslušný graf.



Obrázek 4.15: Orbital 1s s barevně vyznačenými znaménky



Obrázek 4.16: Orbital 2s s barevně vyznačenými znaménky

Ještě je důležité zmínit, proč je výhodné oddělovat od sebe znaménka vlnové funkce barevně, když vlnová funkce sama o sobě význam nemá. Důvod je ten, že v místě, kde se mění znaménko vlnové funkce je hodnota vlnové funkce nulová (znázorněno na obrázku). Pokud je nulová hodnota vlnové funkce je nulová i její druhá mocnina absolutní hodnoty tedy hustota pravděpodobnosti. A z nulovou hodnotou hustoty pravděpodobnosti souvisí i nulová pravděpodobnost a elektron se na tomto místě nalézat nemůže. Shrňme tedy následující tvrzení. Barevné grafické znázornění nám v místě změny barvy (změně znaménku vlnové funkce) prozradí kde je pravděpodobnost výskytu elektronu nulová.

Nyní přišel čas na to ukázat si zde již přípustnou interpretaci grafické znázornění orbitalů (a). Tyto interpretace jsou možné vidět v následující tabulce.

Tabulka 4.10: správná a nesprávná interpretace znázornění

správná definice	nesprávná definice
Hustota bodů znázorňuje, jak je v daném místě vysoká hustota pravděpodobnosti. Barva bodů znázorňuje znaménko vlnové funkce (orbitalu).	Hustota bodů znázorňuje, jak je v daném místě vysoká pravděpodobnost nalezení elektronu.

Pro upřesnění jen uveďme, že nepřípustná definice se mimo jiné neshoduje ani s obrázkem radiální distribuční funkce v závislosti na vzdálenosti od jádra. (Ze které se bezprostředně integrací přes danou vzdálenost od jádra pravděpodobnost počítá). Tento graf zde přikládáme pro ilustraci. Zásadní rozdíl je v tom, že radiální distribuční funkce má maximum v tzv. nejpravděpodobnější hodnotě (která je vždy odlišná od místa na jádře), ale bodové znázornění obrázku má největší hustotu bodů právě na jádře.

Nyní si ukážeme další znázornění orbitalů. Jen pro upřesnění uvádíme, že orbitaly jsou prostorové útvary. s-orbitaly jsou koule a p-orbitaly jsou „prostorové osmičky“. Toto znázornění se dá interpretovat dvěma základními způsoby:

1. Hraniční ploše tohoto znázornění se říká izoplocha a je to plocha konstantní hustoty pravděpodobnosti. Tedy všechny body ležící na této ploše mají stejnou hustotu pravděpodobnosti. (tato hustota pravděpodobnosti není totiž přesně daná závisí jakou zvolíme velikost grafického znázornění).

2. Objem, který grafické znázornění orbitalu vymezuje je úměrný pravděpodobnosti výskytu elektronu uvnitř (velikost daného útvaru závisí na tom, jakou velikost této pravděpodobnosti zvolíme).

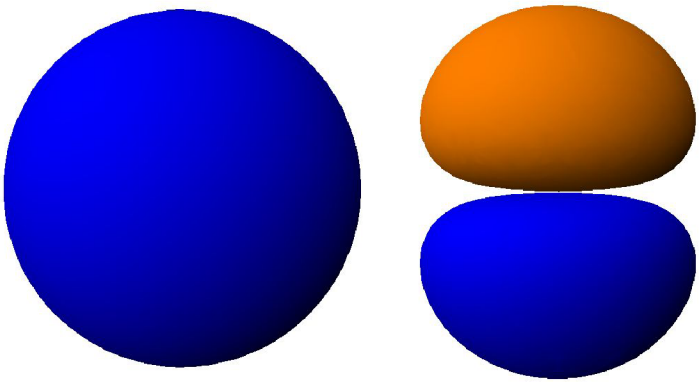
V následující tabulce pro orbital 1s uvádíme jak spolu souvisí poloměr grafické znázornění (vzdálenost elektronu od jádra) a pravděpodobnost, že nalezneme elektron někde v tomto vymezeném objemu.

Dále si ještě zmíníme jaká by mohla být chybná interpretace tohoto obrázku. Nejvíce používanou chybou u tohoto obrázku je, to že orbitalem nazýváme přímo ten obrázek. Tedy pro orbital 1s říkáme, že má tvar koule. To samozřejmě není pravda, protože orbital je stav a ten nemá tvar.

Tabulka 4.11: Pravděpodobnost výskytu elektronu uvnitř námi ohraničeného útvaru podle volby poloměru tohoto útvaru

poloměr grafického znázornění	$1a_0$	$2a_0$	$4a_0$
pravděpodobnost výskytu elektronu uvnitř	32,3 %	76,2 %	98,6 %

Jako poslední věc si vysvětlíme, proč jsou grafická znázornění orbitalů s kulového tvaru a grafická znázornění orbitalů p mají tvar jiný. Už víme, že tvar grafického znázornění orbitalu určuje, jak je rozložená hustota pravděpodobnosti. Orbitaly s jsou kulové symetrické, protože jejich hustota pravděpodobnosti nezávisí na úhlu, pod kterým se z jádra vydáme, ale pouze na vzdálenosti od jádra. Orbitaly p nejsou kulové symetrické a tedy preferují některé směry více, jak je vidět z grafického znázornění orbitalů.



Obrázek 4.17: Izoplochy orbitalů 1s, 2s a 2p

Tuto skutečnost si vysvětlíme, tak že budeme vypisovat jednotlivé vlnové funkce pro konkrétní orbitaly. Než to, však budeme dělat je důležité se seznámit s tím, že vlnovou funkci lze rozdělit na součin dvou funkcí. Budeme o nich mluvit, jako o dvou částech vlnové funkce. Těmito částmi jsou radiální část vlnové funkce $R_{nl}(r)$ a angulární (úhlová) část $Y_{l,m}(\varphi\theta)$. Matematicky tuto skutečnost zapisujeme:

$$\Psi(r,\varphi,\theta) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\varphi,\theta) \tag{4.23}$$

V následující tabulce si ukážeme na čem jsou závislé jednotlivé jednotlivé části vlnové funkce. Tato skutečnost nám, také objasní závislosti a indexy v předcházející rovnici. V následující tabulce je vidět, jaká část vlnové funkce závisí na jakých kvantových číslech a také to, na jakých proměnných záleží jaká část vlnové funkce ve sférických souřadnicích.

Nyní si již ukážeme tabulku, ve které budeme vynášet vlnové funkce konkrétních orbitalů a to rozdělené na radiální a angulární (vlnovou část) jejich druhé mocniny (hustoty pravděpodobnosti. Z nich se, pak budeme snažit vysvětlit, proč grafické znázornění orbitalů s je symetrické a orbitaly p nikoliv.

Pokud se snažíme vysvětlit proč jsou grafická znázornění kulově symetrická (s-orbitaly) a nejsou kulově symetrická (p-orbitaly i jiné). Zajímat nás bude poslední řádek a to z toho

Tabulka 4.12: caption

část vlnové funkce	kvantová čísla (parametry)	sférické souřadnice (závislost)
radiální	n, l	vzdálenost od jádra (r)
úhlová	l, m	úhly φ, θ

Tabulka 4.13: caption

Typ Orbitalu	$R_{n,l}$	$\lvert R_{n,l}\rvert^2$	$Y_{l,m}$	$\lvert Y_{l,m}\rvert^2$
1s	$\frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$	$\frac{4}{a_0^3} e^{\frac{2r}{a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\frac{1}{4\pi}$
2s	$\frac{1}{2\sqrt{2a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{1}{8a_0^3} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{\frac{r}{a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\frac{1}{4\pi}$
2p	$\frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{4}{a_0^3} e^{\frac{r}{a_0}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}} \sin\theta$	$\frac{3}{8\pi} \sin^2\theta$

důvodu, že úhlová část popisuje, jaké úhly jsou preferovanější než jiné. Pokud nás bude zajímat úhlová závislost hustoty pravděpodbnosti je třeba použít druhou mocnina absolutní hodnoty úhlové části vlnové funkce.

Když se nyní na poslední řádek podíváme, tak zjistíme, že úhlová část u s-orbitalů na žádných úhlech nezávisí (je to konstanta) a z toho vyplývá, že všechny úhly jsou stejně preferované. Tedy hustota pravděpodobnosti je závislá pouze na poloměru (vzdálenosti od jádra) a právě povrch koule je z matematického hlediska množina všech bodů, která má od daného bodu stejnou vzdálenost. Jak jsme si ukázali u významu grafického znázornění orbitalu (b)-(1) je právě hustota pravděpodobnosti touto plochou. U p-orbitalu je vidět v tabulce, že druhá mocnina úhlové části vlnové funkce je závislá na úhlech a tedy grafické znázornění p-orbitalu nemůže být kulově symetrické.

Tato podkapitola byla inspirována texty: [3][10][11].

Závěr

Ve své bakalářské práci jsem usiloval především o to, abych studentům posledních ročníků středních škol vysvětlil základní principy kvantové teorie, a to bez použití vyšší matematiky. Text se snaží vyjít s pojmy limita, derivace, integrál a se základy teorie pravděpodobnosti v rozsahu učiva závěrečných ročníků středních škol, typicky v matematických seminářích. Pro studenty, kteří se s pojmem integrál ještě nesetkali, může text „fungovat“ na úrovni intuitivní představy plochy pod křivkou, čímž může vzniknout základ pro pozdější formálnější uchopení.

Těžištěm první kapitoly je zopakování znalostí z klasické středoškolské fyziky. Pokud bychom chtěli, aby v této kapitole zaznělo vše důležité, co historicky vedlo ke vzniku kvantové teorie, vyžádalo by si to důkladnější zpracování, než jaké umožňuje jedna kapitola v rámci bakalářské práce. Nejnáročnějším úkolem při psaní této práce bylo zvolit vždy matematicky přiměřený, a přitom fakticky správný výklad. Pečlivé zvážení si vyžádala i analýza paralel ze světa klasické fyziky, tak aby tyto paralely byly čtenářům dobře známé. Konečně, nemalá snaha byla věnována rozboru možných zavádějících výkladů kvantověmechanických pojmů, především pak centrálního pojmu orbital. Autor tohoto textu doufá, že se jeho příspěvek snad ukáže užitečným při výuce pravděpodobně nejtěžší oblasti, jíž se středoškolská chemie dotýká, a současně přispěje k lepšímu propojení výuky fyziky a chemie.

Pokud bychom měli navrhnout možné pokračování tohoto textu, bylo by lákavé základní principy kvantové teorie, o něž jsme se snažili, aplikovat na atomy s více elektrony. Zavedením pojmu efektivního náboje a jeho jednoduchého výpočtu ze Slaterových pravidel lze ukázat,, jak elegantně kvantová teorie dokáže předpovědět periodicitu atomových vlastností. Využitím tohoto přístupu (bohužel ve většině vysokoškolských učebnic obecné chemie nedoceněného) lze většinu trendů, které se studenti učí nazpaměť, odvodit a ukázat tím univerzálnost a krásu kvantového popisu hmoty.

Seznam použité literatury

[1] SVOBODA Emanuel a kol. *Přehled středoškolské fyziky*. 5. vydání. Praha: Prometheus, 2014. 551 s. ISBN 978-80-7196-438-4

[2] KRYNICKÝ Martin. *Realistické učebnice fyziky a matematiky* [online]. [cit. 2022-01-01]. Dostupné z: http://www.realisticky.cz

[3] BEISER Arthur. *Úvod do moderní fyziky*. 2. vydání. Praha: Academia, 1977. 632 s.

[4] HALLIDAY David, RESNICK Robert, WALKER Jearl. *Fyzika 2*. Brno: Vutium, 2013. 672 s. ISBN 978-80-214-4123-1

[5] HALLIDAY David, RESNICK Robert, WALKER Jearl. *Fyzika 1*. Brno: Vutium, 2013. 576 s. ISBN 978-80-214-4123-1

[6] REICHL Jaroslav. *Multimediální učebnice fyziky* [online]. [cit. 2022-01-01]. Dostupné z: http://fyzika.jreichl.com

[7] CELÝ Jan. *Základy kvantové mechaniky pro chemiky, I. principy, II. aplikace*. Brno: Univerzita J. E. Purkyně, 1981. 350 s.

[8] ŠTOLL Ivan. *Dějiny fyziky*. 1. vydání. Praha: Prometheus, 2009. 561 s. ISBN: 978-80-7196-375-2

[9] KULHÁNEK Petr. *Vybrané kapitoly z teoretické fyziky II*. 2. vydání. Praha: AGA, 2020. 370 s. ISBN: 978-80-906638-3-1

[10] LÖWE, John P. *Quantum chemistry*. 3. vydání. San Diego: Elsevier Academic Press, 1993. 711 s. ISBN 0124575552.

[11] SKÁLA Lubomír. *Úvod do kvantové mechaniky*. 1. vydání. Praha: Academia, 2005. 270 s. ISBN: 978-80-200-1316-4

[12] SLAVÍČEK Petr, MUCHOVÁ Eva a kol. *Kvantová chemie*. 1. vydání. Praha: VŠCHT, 2019. 296 s. ISBN: 978-80-7592-042-3

[13] ATKINS Peter, DE PAULA Julio. *Fyzikální chemie*. 1. vydání. Praha: VŠCHT, 2013. 944 s. ISBN: 978-80-7080-830-6

[14] MUSILOVÁ Jana, MUSILOVÁ Pavla. *Matematika I pro porozumění a praxi*. 2. vydání. Brno: Vutium, 2016. 332 s. ISBN: 978-80-214-3631-2

[15] BEDNAŘÍK Milan, ŠIROKÁ Miroslava. *Fyzika pro gymnázia: Mechanika*. 4. vydání. Praha: Prometheus, 2011. 283 s. ISBN: 978-80-7196-382-0

[16] MUSILOVÁ Jana, MUSILOVÁ Pavla. *Matematika II/1 pro porozumění a praxi*. 1. vydání. Brno: Vutium, 2012. 341 s. ISBN: 978-80-214-4071-5

[17] DOŠLÁ Zuzana, KUBEN Jaromír. *Diferenciální počet funkcí jedné proměnné*. 2. vydání. Brno: Masarykova univerzita, 2012. 203 s. ISBN: 978-80-210-5814-9

[18] ODVÁRKO Oldřich. *Matematika pro gymnázia – Funkce*. 4. vydání. Praha: Prometheus, 2008. 168 s. ISBN: 978-80-7196-357-8

[19] ODVÁRKO Oldřich. *Matematika pro gymnázia – Posloupnosti a řady*. 3. vydání. Praha: Prometheus, 2008. 128 s. ISBN: 978-80-7196-391-2

[20] CALDA Emil, DUPAČ Václav. *Matematika pro gymnázia – Kombinatorika, pravděpodobnost, statistika*. 5. vydání. Praha: Prometheus, 2008. 168 s. ISBN: 978-80-7196-365-3

[21] VACÍK Jiří a kol. *Přehled středoškolské chemie*. 2. vydání. Praha: SPN, 1999. 368 s. ISBN: 978-80-7235-108-7

Zdroje obrázků

Většina obrázků je vlastní tvorba. K jejich vytvoření byly použity programy: Paint.NET, QtiPlot, Orbital Viewer a ChemSketch.

Zdroje obrázků, které nejsou vlastní tvorbou jsou zde:

- Obrázek 1.2: Vlnová délka vlny na hladině; autor: Linnaea Mellete; zdroj: `publicdomainpictures.net`; originální název: Water ripple over rocks in a pond.
- Obrázek 1.3: Difrakční obrazec; autor: Sven Hovmoeller; zdroj: `commons.wikimedia.org`; originální název: Electron diffraction pattern of an inorganic crystal, a tantalum oxide.
- Obrázek 1.4: Schéma vysvětlující veličiny v Braggově vztahu; autor: uživatel Hydrargium; zdroj: `commons.wikimedia.org`; originální název: Bragg diffraction from cubic crystal lattice.
- Obrázek 4.4: Pravidlo pravé ruky; autor: uživatel Acdx; zdroj: `commons.wikimedia.org`; originální název: Illustration of the right-hand rule for the cross product.