

1.3 ŘEŠENÍ SR PRO ATOM VODÍKU

V této kapitole se dozvíte:

- jak se v rámci kvantové teorie popisuje atom vodíku;
- které fyzikální informace dostaneme řešením SR pro atom vodíku;
- k čemu slouží kvantová čísla;
- proč byl zaveden spin elektronu.

Budete schopni:

- napsat tvar SR pro atom vodíku a vysvětlit význam symbolů použitých při jejím zápisu;
- objasnit v hrubých rysech postup řešení této SR;
- uvést důležité výsledky řešení SR pro atom vodíku;
- definovat pojem atomový orbital;
- vysvětlit vztah kvantových čísel a jim odpovídajících fyzikálních charakteristik atomu;
- popsat stav elektronu v atomu pomocí kvantových čísel;
- vysvětlit pojem spinu;
- popsat experimenty, které vedly k zavedení spinu elektronu.

Klíčová slova této kapitoly:

Schrödingerova rovnice, atom vodíku, kvantová čísla, atomový orbital, spin



Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

3 + 2 hodiny (teorie + řešení úloh)

Atom vodíku je nejjednodušším atomem. Představuje systém dvou částic, elektronu a jádra, vázaných elektromagnetickou interakcí. Vzhledem ke skutečnosti, že hmotnost jádra *atomu vodíku* je řádově 1000krát vyšší než hmotnost elektronu, je možné v základním přiblížení (tzv. limitní přiblížení nekonečně velké hmotnosti, které neuvažuje pohyb jádra) popisovat pouze pohyb elektronu v poli jádra. Model atomu vodíku je nutno popisovat kvantově. Musíme tedy pro tento systém sestavit a vyřešit *Schrödingerovu rovnici* (SR). Pokud uvažujeme v atomu vodíku pouze elektrostatickou interakci, která je popsána *Coulombovým zákonem*, dostáváme bezčasovou SR pro atom vodíku v následujícím tvaru.



SR pro atom vodíku

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right) \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z)$$

Jádro je umístěno v počátku systému souřadnic, m je hmotnost elektronu. Vzhledem ke tvaru coulombického potenciálu není možné řešit rovnici separací proměnných v kartézských souřadnicích. Protože je potenciál sféricky symetrický, je výhodné pro řešení SR použít sférické souřadnice. Rovnice pak přejde na tvar:



Úkol k textu.

Zopakujte si zavedení sférických souřadnic a napište, jaký je vzájemný vztah sférických a původních kartézských souřadnic.

SR pro atom vodíku ve sférických souřadnicích

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{r,\vartheta,\varphi} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \Psi(r, \vartheta, \varphi) = E\Psi(r, \vartheta, \varphi),$$

$$\text{kde } \Delta_{r,\vartheta,\varphi} = \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).$$

Hledaná vlnová funkce je tedy funkcí sférických souřadnic r , ϑ a φ .

Poznámky:

- Řešení bezčasové SR $\hat{H}\Psi = E\Psi$, je speciálním případem řešení obecné úlohy $\hat{A}\Psi = A\Psi$, kde \hat{A} je operátor nějaké fyzikální veličiny. Tato úloha se označuje jako *hledání vlastních funkcí a vlastních hodnot (vlastních čísel) operátoru \hat{A}* .
- Hledáme funkce Ψ (tzv. *vlastní funkce*) a jim odpovídající hodnoty A (tzv. *vlastní hodnoty* nebo *vlastní čísla*), které vyhovují rovnici $\hat{A}\Psi = A\Psi$.
- Vlastní hodnoty A představují dovolené hodnoty příslušné fyzikální veličiny. Jsou to jediné hodnoty, které můžeme naměřit přesně. Soubor těchto hodnot se označuje jako **spektrum** příslušné veličiny.
- Pokud existuje konečný nebo nekonečný, ale spočetný počet vlastních hodnot, tzn. můžeme očíslovat tyto hodnoty přirozenými čísly, označujeme spektrum jako **diskrétní**. V kvantové mechanice se používá (z praktických nebo historických důvodů) k očíslování vlastních hodnot (a vlastních funkcí) i čísel celých (tzv. celočíselné hodnoty) či též lichých celočíselných násobků $\frac{1}{2}$ (tzv. poločíselné hodnoty). Tato čísla jednoznačně přiřazená příslušné vlastní (též dovolené) hodnotě dané fyzikální veličiny se označují jako **kvantová čísla**.

- Stav systému s určitou hodnotou dané fyz. veličiny lze určit třemi způsoby:
 1. pomocí vlnové funkce – **vlastní funkce operátoru** \hat{A} , s pomocí vztahu $\hat{A}\Psi = A\Psi$ pak můžeme určit příslušnou hodnotu veličiny,
 2. určením **dovolené hodnoty fyzikální veličiny**,
 3. místo určení dovolené hodnoty fyzikální veličiny či odpovídající vlastní funkce můžeme uvést hodnotu příslušného kvantového čísla a , hodnota fyzikální veličiny je pak určena příslušným vztahem s kvantovým číslem, tedy $A_a = f(a)$, tento vztah je analogií kvantovací podmínky (viz **Bohrův model atomu**).
- Řešení bezčasové SR nemusí být obecně jednoznačné. Jedné hodnotě energie může odpovídat více normovaných vlnových funkcí – hovoříme o **degenerované hodnotě energie**. V tomto případě je možné najít další fyzikální veličiny, které jsou současně měřitelné (viz **relace neurčitosti**), tak aby stav systému (vlnová funkce) byl(a) s pomocí jejich hodnot či uvedením odpovídajících kvantových čísel určen jednoznačně.

Řešení bezčasové SR pro atom vodíku není jednoznačné a hledá se tak, aby výsledná vlnová funkce nebyla pouze vlastní funkcí hamiltoniánu, ale také vlastní funkcí operátorů velikosti orbitálního momentu hybnosti a z-ové složky momentu hybnosti). Řešení je potom možné nalézt v tomto tvaru.

Tvar řešení SR pro atom vodíku

$$\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Funkce $R_{nl}(r)$ je **radiální část vlnové funkce** a funkce $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ je **angulární (úhlová) část vlnové funkce**. Čísla n , l a m jsou tzv. **kvantová čísla**, která číslovají dovolené hodnoty celkové energie E_n , velikosti orbitálního momentu hybnosti $|\vec{l}|$ a z-ové složky orbitálního momentu hybnosti $l_{z,m}$.



Atomový orbital (AO)

Vlnová funkce atomu určená hodnotami kvantových čísel n , l a m se označuje jako **atomový orbital**.



Protože $|\Psi|^2$ určuje hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu v daném bodě prostoru, bývá vhodné zobrazit buď přímo daný AO, nebo jemu odpovídající hustotu pravděpodobnosti. Takové zobrazení se často používá v chemii, protože dává představu o směrech s výraznějším výskytem elektronu.



Úkol k textu

Uveďte jaké základní informace získáme řešením SR pro atom vodíku.

Úkol k zamyšlení

Navrhněte, jak by bylo v principu možno ověřit správnost výsledků získaných z řešení SR pro atom vodíku.



1.3.1 KVANTOVÁ ČÍSLA



Hlavní kvantové číslo n

může nabývat hodnot 1, 2, 3, 4, ... (alternativní značení K, L, M, N, O, P, Q, ...).

- Určuje tzv. **slupku atomu** (všechny atomové orbitály se stejným n patří do téže slupky).
- V elektrostatickém přiblížení čísluje dovolené hodnoty energie $E_n = E_0 \frac{1}{n^2}$, kde E_0 je energie základního stavu. Tento vztah je identický s výsledkem, který dostaneme v rámci **Bohrova modelu atomu**.
- Soubor těchto dovolených hodnot představuje **energetické spektrum atomu vodíku**.



Vedlejší kvantové číslo l

může nabývat hodnot 0, 1, 2, 3 až $n - 1$ (alternativní značení s, p, d, f, g, h, i, k, l...), kde n je hlavní kvantové číslo.

- Určuje tzv. **podslupku** dané slupky. Tedy n -tá slupka se skládá z n podslupek. Všechny atomové orbitály dané slupky, tj. s určitým n , které mají určeno l , patří do l -té podslupky, n -té slupky.
- Hodnota l určuje dovolené hodnoty velikosti orbitálního momentu hybnosti $|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$.
- V případě započtení relativistických korekcí závisí hodnota energie i na kvantovém čísle l .



Magnetické kvantové číslo m

může nabývat pouze následujících hodnot $-l, -l+1, -l+2, -l+3, \dots, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, \dots, l-3, l-2, l-1, l$ (alternativní značení $\dots, -\delta, -\pi, \sigma, \pi, \delta, \varphi, \gamma, \iota, \kappa, \lambda, \dots$, kde σ odpovídá $m = 0$).

- Spolu s hlavním a vedlejším kvantovým číslem určuje **atomový orbital**. V l -té podslupce může být pouze $2l+1$ orbitalů:

Hodnota l	Slupka	$2l+1$ orbitalů
0	s	1
1	p	3
2	d	5
3	f	7

- Hodnota m čísluje dovozené hodnoty z -ové složky orbitálního momentu hybnosti: $l_z = m\hbar$. Pojmenování magnetického čísla má svůj původ ve skutečnosti, že na něm závisí energie atomu v magnetickém poli (viz **Zeemanův jev**).

Protože elektron má **vlastní moment hybnosti** \vec{s} neboli **spin**, je třeba jeho stav v atomu popsat ještě **spinovým číslem** s a **magnetickým spinovým číslem** m_s . V případě elektronu je spinové číslo $s = 1/2$ (není nutné ji explicitně uvádět), odpovídající magnetické spinové číslo elektronu pak nabývá pouze dvou níže uvedených hodnot.

Magnetické spinové číslo m_s

může nabývat hodnot $\pm 1/2$.



- Pro zjednodušení se i o m_s často hovoří pouze jako o **spinovém čísle** nebo jako o „spinu“, či „hodnotě spinu“.
- Jiné částice mohou mít obecně jiné hodnoty spinového čísla s než má elektron, vždy jsou to ale násobky $1/2$.
- Pro vybranou částici je hodnota spinového čísla s jednoznačně dána, proto pro určení jejího spinového stavu stačí uvést pouze hodnotu magnetického spinového čísla m_s .
- Magnetické spinové číslo částice se spinovým číslem s může obecně nabývat hodnot $-s, -s+1, -s+2, \dots, s-3, s-2, s-1, s$, tj. celkem $2s+1$ hodnot (srovnej dovozené hodnoty pro elektron).
- Velikost spinu je určena hodnotou spinového čísla: $|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar$, hodnota z -ové složky spinu pak hodnotou magnetického spinového čísla $s_z = m_s \hbar$. V případě elektronu tedy dostáváme $|\vec{s}| = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$ a $s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$.

Úkol k textu

Určete všechny směry, kterými může mířit vektor spinu elektronu. Obdobně určete dovozené směry orbitálního momentu hybnosti elektronu v podslupce p.



Úkol k zamyšlení.

Proč fyzikové při popisu stavu atomů používají raději kvantová čísla, než jim odpovídající hodnoty fyzikálních veličin v běžných jednotkách?



Průvodce studiem.

Je to opravdu zvláštní, že v kvantové fyzice nemohou často fyzikální veličiny nabývat libovolných hodnot, jak jsme zjistili na příkladu atomu vodíku. Nicméně je to fakt ověřený experimenty. Při čtení dalšího textu se rovněž rychle vzdejte představy, že elektron krouží kolem jádra po nějaké konkrétní dráze.



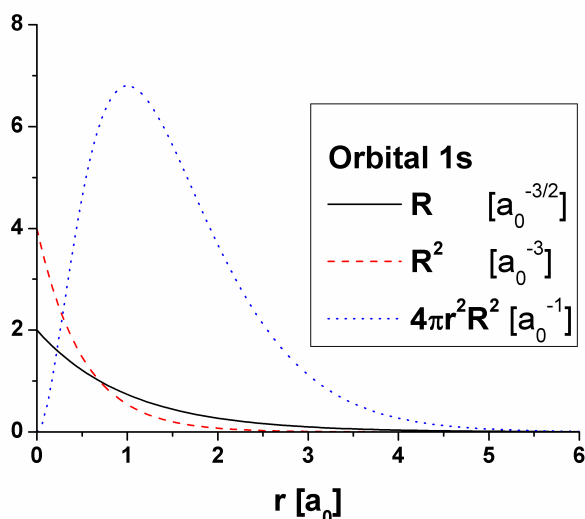
1.3.2 ZNÁZORNĚNÍ ATOMOVÝCH ORBITALŮ

Atomové orbitály je možno znázornit různými způsoby. *Radiální část vlnové funkce* pro několik prvních hodnot *kvantových čísel* n a l je uvedena v tabulce:

n	l	$R_{nl}(r)$
1	0	$2a_0^{-3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$
2	0	$2^{-1/2} a_0^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$
2	1	$(24)^{-1/2} a_0^{-5/2} r \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$
3	0	$2 \cdot 3^{-5/2} a_0^{-3/2} \left(3 - \frac{2r}{a_0} + \frac{2r^2}{9a_0^2}\right) \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)$
3	1	$2^{3/2} 3^{-7/2} a_0^{-5/2} r \left(2 - \frac{r}{3a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)$
3	2	$2^{3/2} 3^{-9/2} 5^{-1/2} a_0^{-7/2} r^2 \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)$

Konstanta a_0 je *Bohrův poloměr atomu*.

Protože radiální část vlnové funkce závisí pouze na r , je možné zobrazit její průběh pomocí grafu ve dvou osách. Buď se zobrazuje přímo funkce $R_{nl}(r)$, nebo její druhá mocnina, tj. R^2 , popřípadě hodnota $4\pi r^2 R^2$, jelikož výraz $4\pi r^2 R^2 dr$ představuje pravděpodobnost nalezení elektronu ve vzdálenosti r až $r + dr$ od jádra, tj. v kterémkoliv směru. Jinak řečeno, jde o pravděpodobnost nalezení elektronu v kulové vrstvě o poloměru r a tloušťce dr .

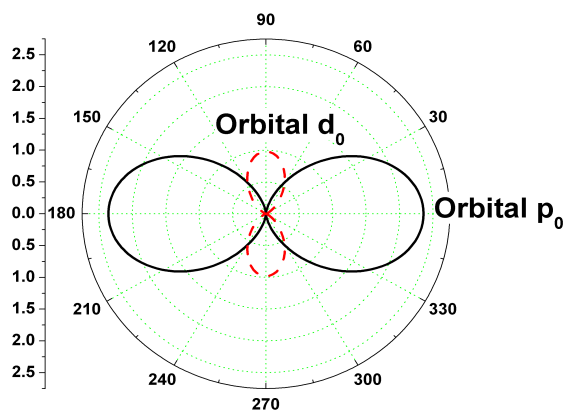


Angulární část vlnové funkce představují tzv. **kulové funkce** (též sférické funkce), jejichž tvar pro několik prvních hodnot l a m je uveden v tabulce:

l	m	$Y_{lm}(\theta, \varphi)$
0	0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$
1	± 1	$\mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \exp(\pm i\varphi)$
2	0	$-\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \vartheta)$
2	± 1	$\mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta \exp(\pm i\varphi)$
2	± 2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta \exp(\pm i2\varphi)$

Kulové funkce jsou funkcemi dvou úhlů, navíc se jedná o komplexní funkce, proto je jejich znázornění obtížnější než v případě radiální vlnové funkce. Z tohoto důvodu se znázorňuje většinou veličina $|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2$, která už je reálnou funkcí a navíc závisí jen na úhlu ϑ . Výraz $|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ má význam pravděpodobnosti nalezení elektronu ve směrech určených úhly mezi ϑ a $\vartheta + d\vartheta$ a mezi φ a $\varphi + d\varphi$. Jinak řečeno, jde o pravděpodobnost nalezení elektronu v elementu prostorového úhlu $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$.

Funkci $|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2$ je možno znázornit ve formě polárního diagramu, tj. ve směru daném úhly ϑ a φ se vykreslují body ve vzdálenosti $|Y_{lm}|^2$ od počátku. Graf tedy představuje plochu v prostoru. Vzhledem k tomu, že $|Y_{lm}|^2$ závisí pouze na úhlu ϑ , je tato plocha symetrická podle osy z . Pro získání představy o tvaru funkce $|Y_{lm}|^2$ stačí znázornit řez libovolnou rovinou procházející osou z , např. rovinou xz ($\varphi = 0$).



Znázornění celých **atomových orbitalů** (AO) je podstatně těžší než zobrazení samostatné **radiální části AO** nebo **angulární části AO**. Jedná se o komplexní funkce tří proměnných r , ϑ a φ . Abychom nemuseli zobrazovat reálnou a imaginární část AO, volí se pro zobrazení

- hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v bodě \vec{r}
 $|\Psi_{nlm}|^2 = \Psi_{nlm}^* \Psi_{nlm}$.
- reálné atomové orbitály $\Psi'_{nl\mu}$, které se získají vhodnou lineární kombinací původních (komplexních) atomových orbitalů Ψ_{nlm} s pevnou hodnotou n a l , ale různou hodnotou m .
- hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v bodě \vec{r} , pro stavy odpovídající reálným atomovým orbitalům z předešlé odrážky,
 $|\Psi_{nl\mu}|^2 = \Psi_{nl\mu}^* \Psi_{nl\mu}$.

Ve druhém případě se využívá skutečnosti, že libovolná lineární kombinace řešení bezčasové SR je rovněž řešením SR. Reálné orbitály už ovšem nejsou na rozdíl od původních funkcí vlastními funkcemi operátoru z -ové komponenty orbitálního momentu hybnosti l_z . Popisují tedy stavy, které nemají určitou hodnotu l_z .



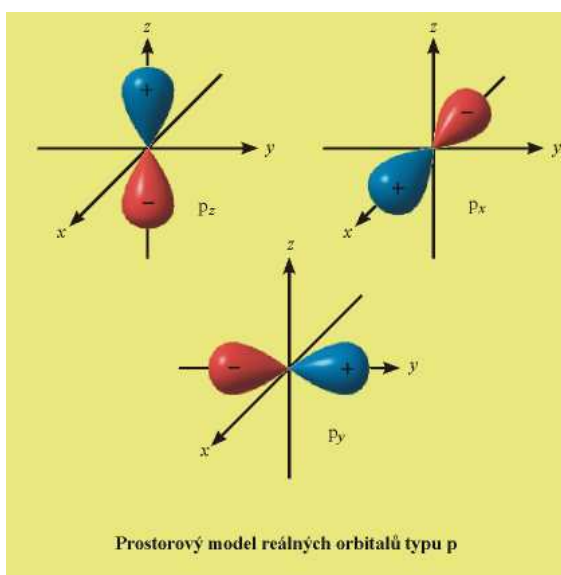
Reálné orbitály typu p

Například reálné AO typu p dostaneme kombinacemi:

$$\Psi_{n1x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{n1-1} + \Psi_{n11}),$$

$$\Psi_{n1y} = \frac{-i}{\sqrt{2}}(\Psi_{n1-1} - \Psi_{n11}),$$

$$\Psi_{n1z} = \Psi_{n10}.$$



Průvodce studiem.

Podobné obrázky už jste jistě viděli v nějaké učebnici chemie, třeba na střední škole, bez toho, že byste znali analytický tvar vlnových funkcí. Chemikové jsou přitom schopni na základě tvaru orbitalů objasnit řady věcí, např. vlastnosti vazeb (násobnost vazby či vazebné úhly).

1.3.3 EXPERIMENTÁLNÍ DŮVODY PRO ZAVEDENÍ SPINU

V letech 1915 a 1921 byly provedeny dva experimenty, které jsou dnes známy pod označením *Einsteinův – de Haasův pokus* a *Sternův – Gerlachův pokus*. První byl zaměřen na studium gyromagnetického poměru látek, který určuje vztah mezi magnetickým momentem a momentem hybnosti, druhý pak na studium magnetického momentu atomů.

Výsledky obou experimentů nebylo možné vysvětlit na základě klasických představ. Stejně tak elektromagnetické spektrum některých atomů (tzv. *jemná struktura spektrálních čar*) nebylo možné objasnit ani na základě Sommerfeldových představ. Jednalo se zejména o tzv. **dublety** (dvojice blízkých čar) u některých atomů (vodík, sodík aj.).

Úplné objasnění této jemné struktury spekter a výsledků zmíněných experimentů bylo možné teprve na základě kvantové teorie a zejména akceptováním hypotézy o existenci *spinu* (vlastního momentu hybnosti elektronu) a vlastního magnetického momentu elektronu (spinového magnetického momentu), která byla navržena Uhlenbeckem a Goudsmitem.

Tato hypotéza byla přijata jako dodatečný postulát v rámci nerelativistické kvantové fyziky. Existence spinu elektronu vyplývá teprve z *Diracovy relativistické teorie*.

Později se ukázalo, že *spin* a jemu příslušející *magnetický moment* je nutné přiřadit jako jednu ze *základních charakteristik* každé částici (tzv. elementární částici).

Oba výše uvedené experimenty dnes považujeme za důkaz existence spinu (spinu elektronu).

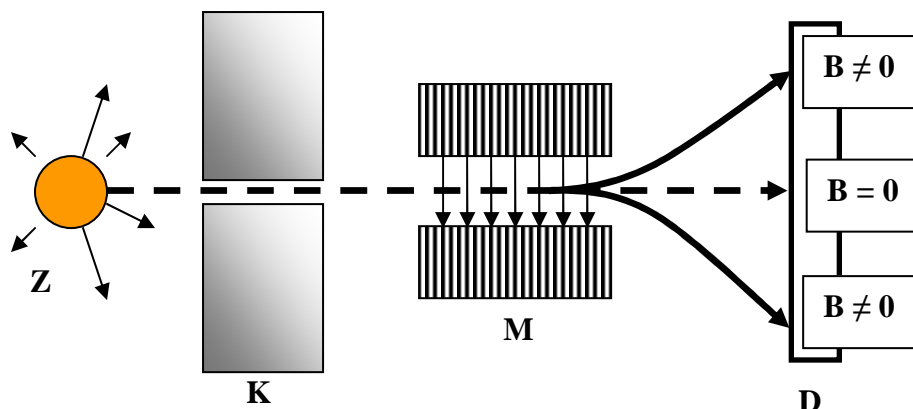
I když z historického hlediska bylo pořadí experimentů opačné, budeme se z důvodu výkladu problematiky věnovat nejdříve Sternovu – Gerlachovu pokusu, který studuje vlastnosti magnetického momentu atomů, a poté Einsteinovým – de Haasovým pokusem, který objasňuje vztahy mezi magnetickým momentem a příslušným momentem hybnosti.

1.3.4 STERNŮV - GERLACHŮV POKUS

V roce 1921 fyzikové Stern a Gerlach realizovali experiment, jehož cílem bylo určení magnetického momentu atomů různých prvků (nejdříve Ag, později Au, Cu, Fe, Li, Na, K), přesněji jeho projekce do směru magnetické pole. Pokud vektor indukce magnetického pole má směr osy z ($\vec{B} = (0, 0, B)$), představuje tato projekce z -ovou komponentu $\mu_{J,z}$ celkového magnetického momentu atomu $\vec{\mu}_J$.

Uspořádání a princip Steinova – Gerlachova experimentu

V experimentu byla jako zdroj atomů použita píčka (pokovená platinová spirála), z níž se do různých směrů odpařovaly jednotlivé atomy. Pomocí kolimátoru („štěrbin“) byl vybrán proud („paprsek“) atomů, které prolétaly nehomogenním magnetickým polem a následně byly detekovány na stínítku.



Sternův-Gerlachův experiment

Z – zdroj atomů (píčka), K – kolimátor vymežující úzký svazek atomů, M – magnet vytvářející nehomogenní magnetické pole (při zapnutí vychyluje původní přímý svazek atomů), D – detektor zachycující stopy atomů.

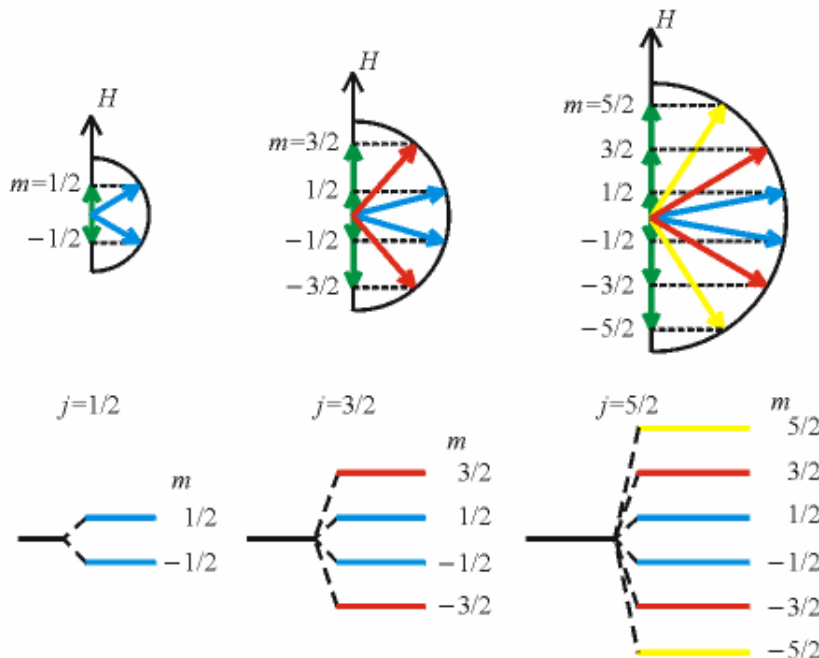
Směr magnetické indukce je kolmý na směr pohybu atomů (např. směr osy x). Pokud nedochází k jejich ionizaci, interagují atomy s magnetickým polem pouze prostřednictvím svého magnetického momentu. Atom tak získává v magnetickém poli dodatečnou energii $U(\vec{r}) = -\vec{\mu}_J \cdot \vec{B}(\vec{r}) = -\mu_{J,z} B(\vec{r})$, což není nic jiného, než potenciální energie magnetického momentu v magnetickém poli.

Na atomy pak působí síla $\vec{F} = -\nabla U(\vec{r}) = \mu_{J,z} \nabla B(\vec{r})$, která je nulová nejen v případě nepřítomnosti pole ($B = 0$), ale též v případě homogenního magnetického pole ($B = \text{konst. v } \vec{r}$), proto bylo v experimentu použito magnetické pole nehomogenní ve směru osy z ($B = B(z)$), které bylo vytvořeno pomocí speciálně tvarovaných pólových nastavců magnetu. Tedy nenulová bude složka síly ve směru osy z : $F_z = \mu_{J,z} \frac{dB(z)}{dz}$.

Průmět magnetického momentu do směru osy z můžeme vyjádřit pomocí jeho velikosti μ_J a úhlu φ , který svírá s osou z : $\mu_{J,z} = \vec{\mu}_J \cdot \vec{z}_0 = \mu_J \cos \varphi$. Z pohledu klasické fyziky může tedy průmět nabývat všech hodnot z intervalu $\langle -\mu_J, \mu_J \rangle$, to znamená, že F_z se rovněž bude spojitě měnit od určité minimální po maximální hodnotu a tedy atomy po vychýlení ve směru osy z mohou dopadat na stínítko v určitém intervalu $\langle -z_{\max}, z_{\max} \rangle$, tedy „stopa“ pozorovaná po dopadu částic by měla být spojitá.

Výsledky Steinova-Gerlachova experimentu

V experimentu ovšem nikdy nebyla pozorovaná spojitá stopa, ale několik (kolem roviny xy) rozložených **diskrétních stop**. Vznik diskrétních stop je důsledkem kvantování magnetického momentu, resp. s ním souvisejícího momentu hybnosti (velikost a z -ová komponenta mohou nabývat jen určitých hodnot).



Prostorové kvantování:

Na obrázku jsou znázorněny dovolené "orientace" celkového momentu hybnosti (resp. celkového magnetického momentu) v magnetickém poli pro $j = 1/2, 3/2, 5/2$.

Z historických důvodů se tento jev označuje často jako „**prostorové kvantování**“, což vychází z klasické představy, že vektor příslušného momentu může zaujímat pouze určité polohy v prostoru.

Kromě důkazu kvantování momentu hybnosti ovšem z výše uvedeného experimentu vplynuly také další skutečnosti.

Podle stavu tehdejších znalostí se předpokládalo, že celkový magnetický moment souvisí pouze s pohybem elektronů v prostoru („obíhají kolem jádra“), tzv. celkový orbitální magnetický moment. Předpokládalo se tedy, že atomy, jejichž celkový orbitální moment hybnosti je roven nule, budou mít magnetický moment rovněž nulový. V některých případech se ale zjistilo, že tyto atomy přesto magnetický moment mají. Byly to např. Ag, Au, Li, Na, K (později též H, u něhož se místo píčky použil elektrický výboj). Interpretace u posledně jmenovaných je jednodušší než v případě jiných atomů, protože mají pouze jeden elektron ve valenční (pod)slupce (celkové momenty zcela obsazených slupek jsou nulové) a tato (pod)slupka je typu s (orbitální momenty elektronu jsou nulové). V těchto případech byly pozorovány dvě diskrétní stopy (rozložené kolem roviny xy).



Shrnutí výsledků Sternova –Gerlachova experimentu

- Při měření byl objeven magnetický moment u atomů, u nichž se předpokládalo, že bude nulový (celkový orbitální magnetický moment těchto atomů je nulový).
- Magnetické momenty atomů jsou kvantovány, projekce momentu do směru magnetického pole může nabývat pouze určitých hodnot.
- U některých atomů bylo zjištěno, že tyto projekce nabývají pouze dvou hodnot.

V obvyklém uspořádání, kdy vektor magnetické indukce (nebo magnetické intenzity) je ve směru osy z , představují tyto projekce z -ové komponenty.

Kvantování fyzikálních veličin je jedním z důsledků kvantové teorie. Existenci a vlastnosti dodatečných (tj. „neorbitálních“) magnetických momentů pozorovaných ve *Sternově-Gerlachově experimentu* (či v jeho dalších modifikacích) se podařilo interpretovat teprve v roce 1925 na základě *hypotézy Uhlenbecka a Goudsmita* o existenci spinu elektronu.



Uhlenbeckova-Goudsmitova hypotéza – spin elektronu

Elektron má vlastní moment hybnosti – **spin** a s ním souvisejícího **vlastní magnetický moment**, jejichž z -ové komponenty mohou nabývat pouze dvou hodnot.

Poznámky:

- Příslušné kvantovací vztahy jsme uvedli v kapitole věnované kvantovým číslicím.
- Nejnázornější je interpretace právě v případě atomů, u nichž byly ve Sternově-Gerlachově experimentu pozorovány dvě stopy. U těchto atomů je jejich celkový magnetický moment tvořen pouze vlastním magnetickým momentem elektronu.
- Později se potvrdilo, že i u řady dalších atomů je možno pozorovat dodatečné („neorbitální“) magnetické momenty, které je možno interpretovat v rámci kvantové teorie. Podrobněji se tomu budeme věnovat v kapitole 1.4.5.



Úkol k textu.

Uveďte hodnoty, kterých může nabývat velikost a z -ová komponenta spinu elektronu.

1.3.5 EINSTEINŮV-DE HAASŮV POKUS

V roce 1915 prováděli fyzikové Einstein a de Haas měření **gyromagnetického poměru** vzorků různých látek (feromagnetika a paramagnetika). Přemagnetováním vzorku s magnetickým momentem $\vec{\mu}_{vz}$ docházelo současně ke změně momentu hybnosti vzorku \vec{b}_{vz} , které jsou vázány níže uvedeným vztahem.

Vztah magnetického momentu a momentu hybnosti – gyromagnetický poměr

$$\vec{\mu}_{vz} = \gamma \vec{b}_{vz}$$

Součinitel γ se označuje jako **gyromagnetický poměr**.

Uspořádání a princip Einsteinova – de Haasova experimentu

Váleček z feromagnetické nebo paramagnetické látky umístěný v cívice je zavěšen v podélné ose z na torzní niti. Pokud pustíme elektrický proud do cívky, vzniklé magnetické pole ($\vec{B} \parallel z$) způsobí zmagnetování vzorku v jednom směru (magnetický moment $\vec{\mu}_{vz} \uparrow \vec{B}$). Pokud poté provedeme komutaci elektrického proudu cívkou, dojde k překlopení magnetické indukce a tím i k přemagnetování vzorku.

Změna magnetického momentu $\Delta\mu_{vz}$ ve směru osy z pak souvisí s odpovídající změnou momentu hybnosti Δb_{vz} , kterou lze určit z úhlu pootočení vzorku na závěsu.

Gyromagnetický poměr pak lze určit jako $\gamma = \frac{\Delta\mu_{vz}}{\Delta b_{vz}}$, což je dáno skutečností, že

platí $\mu_{vz,z} = \gamma b_{vz,z}$, $\Delta\mu_{vz} = \max(\mu_{vz,z}) - [-\max(\mu_{vz,z})] = 2 \max(\mu_{vz,z})$ a analogicky též $\Delta b_{vz} = 2 \max(b_{vz,z})$.

Pokud předpokládáme, že vzorek je tvořen N atomy daného prvku, můžeme oba momenty získat jako součet odpovídajících momentů jednotlivých atomů a výše uvedený gyromagnetický poměr vzorku je rovněž gyromagnetickým poměrem atomu, neboť

$$\gamma = \frac{\Delta\mu_{vz}}{\Delta b_{vz}} = \frac{\max(\mu_{vz,z})}{\max(b_{vz,z})} = \frac{N \max(\mu_{J,z})}{N \max(J_z)} = \frac{\max(\mu_{J,z})}{\max(J_z)} = \gamma_{at},$$

kde $\mu_{J,z}$ a J_z jsou z -ové komponenty celkového magnetického momentu atomu a celkového momentu hybnosti atomu.

Normální hodnota gyromagnetického poměru

V případě orbitálních momentů můžeme už i na základě klasické fyziky odvodit

pro gyromagnetický poměr $\gamma_l = \frac{e}{2m_e}$, což je tzv. **normální hodnota**.



V řadě případů lze naměřit hodnotu odlišnou. Navíc se ukazuje, že k celkovému momentu, ať už se jedná o moment magnetický nebo moment hybnosti, přistupuje další dodatečný moment, který se podařilo interpretovat teprve na základě hypotézy o spinu elektronu.



Anomální hodnota gyromagnetického poměru

V případě atomů s celkovým orbitálním momentem rovným nule pak dostáváme hodnotu $\gamma_s = \frac{e}{m_e}$, což se označuje jako **anomální hodnota gyromagnetického poměru**.

Nejjednodušší je interpretace tohoto gyromagnetického poměru v případě atomů, které mají jediný elektron ve valenční (pod)slupce, která je typu s (orbitální moment elektronu roven nule, např. Ag). V tomto případě představuje totiž γ_s gyromagnetický poměr pro vlastní (těž spinové) momenty elektronu.



Gyromagnetické poměry elektronu

Pro elektron platí

v případě orbitálních momentů $\gamma_l = \frac{\mu_{l,z}}{l_z} = \frac{e}{2m_e}$, tj. **normální hodnota**,

a v případě vlastních momentů $\gamma_s = \frac{\mu_{s,z}}{s_z} = \frac{e}{m_e}$, tj. **anomální hodnota**.

Zde $\mu_{l,z}$, l_z , $\mu_{s,z}$ a s_z jsou postupně z-ové komponenty orbitálního magnetického momentu, orbitálního momentu hybnosti, vlastního (resp. spinového) magnetického momentu a vlastního momentu hybnosti (spinu) elektronu.



Landého faktor

Protože v kvantové mechanice je výhodné uvádět momenty hybnosti v násobcích \hbar a magnetické momenty elektronu nebo atomů v násobcích Bohrových magnetonů $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$, můžeme pro gyromagnetické poměry elektronu psát

$\gamma_l = 1 \cdot \frac{\mu_B}{\hbar}$, resp. $\gamma_s = 2 \cdot \frac{\mu_B}{\hbar}$, pro atomový gyromagnetický poměr pak obecně

$$\gamma = g \cdot \frac{\mu_B}{\hbar}.$$

Bezrozměrový faktor g se označuje jako **Landého faktor**.



Orbitální (resp. dráhový) magnetický moment elektronu

Na základě znalosti příslušného Landého faktoru g_l vedlejšího a magnetického kvantového čísla dostáváme vztahy pro velikost a z-ovou komponentu **orbitálního magnetického momentu**:

$$|\vec{\mu}_l| = \sqrt{l(l+1)}\mu_B \quad \text{a} \quad \mu_{l,z} = m\mu_B.$$

Vlastní (resp. spinový) magnetický moment elektronu

Při uvážení odlišné hodnoty Landého faktoru ($g_s = 2$) dostáváme obdobné vztahy pro velikost a z -ovou komponentu **vlastního magnetického momentu** :

$$|\vec{\mu}_s| = 2\sqrt{s(s+1)}\mu_B \quad \text{a} \quad \mu_{l,z} = 2m_s\mu_B \quad ,$$

kde $s = 1/2$ je spinové kvantové číslo a $m_s = \pm 1/2$ je magnetické spinové kvantové číslo.

Tedy v případě **elektronu** $|\vec{\mu}_s| = \sqrt{3}\mu_B$ a $\mu_{l,z} = \pm\mu_B$.

Shrnutí výsledků Einsteinova – de Haasova experimentu

- Magnetický moment měly i vzorky látek, u jejichž atomů se předpokládá celkový magnetický moment rovný nule (protože měly nulový orbitální magnetický moment). Srovnej *Sternův – Gerlachův experiment*.
- Pro některé látky, resp. jejich atomy, nabýval gyromagnetický poměr odlišné hodnoty, než jaká vyplývá z klasické teorie, podle které magnetický moment (tzv. orbitální magnetický moment) vzniká v důsledku pohybu nabitě částice – elektronu.

Uvedené skutečnosti byly objasněny existencí **vlastního magnetického momentu elektronu** zavedeného spolu se spinem na základě *Uhlenbeckovy-Goudsmitovy hypotézy*. Existence *spinu* a *anomální hodnota gyromagnetického poměru* elektronu je ovšem v rámci nerelativistické kvantové teorie dodatečným postulátem, který je možné odvodit až v rámci relativistické teorie, konkrétně její existence vyplývá z *Diracovy rovnice* pro elektron v magnetickém poli.

Úkol k zamyšlení

Označení *spin* vycházelo z původní představy, že vlastní moment hybnosti elektronu vzniká jeho rotací kolem vlastní osy. Dnes víme, že takto *spin* elektronu vysvětlit nelze. Zkuste objasnit proč.

Test

Vyberte správná tvrzení (podrobný návod je uveden v testu na konci první kapitoly), označte je v tabulce za úkolem a srovnejte správné řešení z klíče.

Úkol 5.**A. Řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku dostaneme**

- vlnovou funkci
- dovolené hodnoty energie systému
- energetické spektrum systému
- atomový orbital
- dovolenou orbitu elektronu
- tvar dráhy elektronu
- maximální počet protonů v jádře

B. Vlnová funkce

- a) popisuje dráhu částice
- b) určuje přesnou polohu částice nebo systému
- c) popisuje stav částice
- d) umocněná na druhou (reálná fce) určuje hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu v daném bodě prostoru
- e) násobená komplexně sdruženou funkcí a elementem objemu dV určuje pravděpodobnost nalezení elektronu v tomto elementu objemu
- f) slouží k výpočtu středních hodnot fyzikálních veličin
- g) určuje hustotu částice

Úkol 6.**A. Hlavní kvantové číslo****B. Vedlejší kvantové číslo****C. Magnetické kvantové číslo****D. Magnetické spinové kvantové číslo**

je omezeno hodnotou (Poznámka: vyznačte jen přímou souvislost)

- a) hlavního kvantového čísla
- b) vedlejšího kvantového čísla
- c) magnetického kvantového čísla
- d) spinového kvantového čísla
- e) magického čísla
- f) neutronového čísla
- g) hodnotou magnetického pole
- h) počtem nukleonů v jádře

Úkol 7.**A. Hlavní kvantové číslo****B. Vedlejší kvantové číslo****C. Magnetické kvantové číslo****D. Magnetické spinové kvantové číslo****určuje**

- a) hodnoty energie v elektrostatickém přiblížení
- b) upřesňuje hodnoty energie při započtení spinorbitální vazby
- c) určuje hodnoty energie v magnetickém poli
- d) velikost orbitálního momentu hybnosti
- e) velikost vlastního momentu hybnosti
- f) velikost orbitálního magnetického momentu
- g) velikost vlastního magnetického momentu
- h) velikost spinu
- i) z-ovou složku orbitálního momentu hybnosti
- j) z-ovou složku vlastního momentu hybnosti
- k) z-ovou složku orbitálního magnetického momentu
- l) z-ovou složku vlastního magnetického momentu
- m) z-ovou složku spinu

Tabulka pro označení správných odpovědí.

5. A	a	b	c	d	e	f	g						
5. B	a	b	c	d	e	f	g						
6. A	a	b	c	d	e	f	g	h					
6. B	a	b	c	d	e	f	g	h					
6. C	a	b	c	d	e	f	g	h					
6. D	a	b	c	d	e	f	g	h					
7. A	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k	l	m
7. B	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	j	l	m
7. C	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	j	l	m
7. D	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k	l	m

Otázky



- SR pro atom vodíku.** Napište SR pro atom vodíku (v elektrostatickém přiblížení). Uveďte základní výsledky řešení SR pro atom vodíku. Srovnajte tvar energetického spektra se spektrem získaným v rámci Bohrova modelu atomu. Definujte pojem atomový orbital. Objasněte stručně přechod od kartézských souřadnic ke sférickým souřadnicím. Objasněte pojmy radiální a angulární část vlnové funkce. Uveďte kvantová čísla, která jednoznačně určují atomový orbital.
- Znázornění atomových orbitalů.** Definujte pojem atomový orbital (AO). Uveďte způsoby znázornění radiální části a úhlové části AO, resp. hustoty pravděpodobnosti. Znázorněte orbitaly typu s, p a d.
- Kvantová čísla v atomu.** Uveďte kvantová čísla, která určují stav elektronu v atomu. U jednotlivých čísel uveďte: hodnoty, kterých mohou nabývat, ekvivalentní značení těchto hodnot, fyzikální veličinu, jejíž hodnoty kvantové číslo určuje, definici této veličiny a vztah pro výpočet hodnoty této veličiny z hodnoty kvantového čísla – kvantový vztah. Vysvětlete pojmy slupka, podslupka, atomový orbital, kvantový stav.
- Spin.** Uveďte základní předpoklady Uhlenbeckovy – Goudsmitovy hypotézy. Napište kvantové vztahy pro velikosti a z-ové komponenty vlastního momentu hybnosti a vlastního magnetického momentu elektronu. Uveďte experimenty nebo jevy, které můžeme považovat za důkaz existence spinu a vlastního magnetického momentu elektronu. Nakreslete schéma a popište uspořádání těchto experimentů. Definujte gyromagnetický poměr γ , Landého faktor g a Bohrov magneton. Napište definiční vztahy pro orbitální moment hybnosti a jemu odpovídající magnetický moment. Uveďte hodnoty γ a g pro vlastní a orbitální momenty elektronu. Kterou z těchto hodnot označujeme jako anomální? Jakých hodnot může nabývat γ , resp. g pro atom? Na základě Bohrova modelu atomu určete velikost orbitálního magnetického momentu pro slupku s hlavním kvantovým číslem n , srovnajte tuto hodnotu se skutečnými hodnotami velikosti orbitálního a celkového magnetického momentu atomu vodíku (zejména pro základní stav $n = 1$).

**Korespondenční úkol**

Zpracujte písemně otázky zadané tutorem, řiďte se přitom jeho pokyny.

**Shrnutí kapitoly**

Řešením stacionární neboli bezčasové Schrödingerovy rovnice sestavené pro případ atomu vodíku v rámci tzv. elektrostatického přiblížení, které uvažuje pouze elektrostatickou interakci mezi elektronem a jádrem ve formě Coulombova zákona, dostaneme přibližný tvar spektra, který je totožný s tvarem získaným z Bohrova modelu. Potud však podobnost končí, protože Bohrova představa o určitých drahách elektronu se nepotvrdila. Ze Schrödingerovy rovnice dostaneme kromě energetického spektra – dovolených hodnot energie, také těmto hodnotám odpovídající vlnové funkce – tzv. atomové orbitaly. Ty umožňují počítat pravděpodobnosti nalezení elektronu a tedy také střední hodnoty fyzikálních veličin, které charakterizují atom, jako je např. moment hybnosti, magnetický moment aj..

Dovolené hodnoty těchto veličin nabývají pro atom, který je vázaným systémem, podobně jako energie pouze určitých tzv. diskrétních, resp. kvantovaných hodnot. Stav elektronu v atomu se ale v kvantové fyzice popisuje většinou nikoliv pomocí těchto kvantovaných hodnot, ale pomocí vhodně zvolených kvantových čísel, které jsou těmto hodnotám přiřazeny. Vztah mezi fyzikální veličinou a kvantovým číslem se označuje jako kvantovací vztah. Hodnoty kvantových čísel nabývají rovněž jen určitých hodnot.

Představu o pravděpodobnosti výskytu elektronu v atomu je možno si udělat vhodným znázorněním atomového orbitalu.

Pozorováním spekter a měření magnetických momentů atomů se zjistilo, že stav elektronu v atomu je nutné charakterizovat další fyzikální veličinou – spinem neboli vlastním momentem hybnosti, resp. odpovídajícím spinovým číslem. Existenci spinu a jemu odpovídajícího vlastního magnetického momentu navrhli Uhlenbeck s Goudsmitem. Jejich hypotéza kromě dubletů ve spektru atomu vodíku dobře objasnila zejména výsledky Sternova-Gerlachova a Einsteinova – de Haasova pokusu. Výsledky obou experimentů jsou závislé na celkovém magnetickém momentu atomu, jehož správnou hodnotu dostaneme teprve po započtení nejen orbitálních magnetických momentů elektronů v atomu, ale také jejich vlastních neboli spinových magnetických momentů.

