

Atomová a jaderná fyzika

Fyzika elektronové obalu atomů a interakce atomů

Fyzika atomového jádra a fyzika elementárních částic

Obsah

TÉMA 1 (atomová fyzika)

- Atomová fyzika – úvod
- Vznik a vývoj atomové teorie
- Základy kvantové teorie

Obsah

TÉMA 2

(atomová fyzika)

- Řešení SR pro atom vodíku
- Víceelektronové atomy
- Interakce atomů

Obsah

TÉMA 3 (jaderná fyzika)

- Jaderná fyzika – úvod
- Struktura a vlastnosti atomového jádra
- Radioaktivita
- Jaderné reakce
- Fyzika elementárních částic

Informace:

Průběžně aktualizované prezentace k přednášce

<https://nano.osu.cz/7atjfprezentace/>

Sledujte rok prezentace – doplnění, revize a opravy budou průběžně

Otázky ke zkoušce (tematické okruhy)

<https://nano.osu.cz/7atjforkruhy/>

Skripta nejsou od posledního vydání aktualizována

<https://nano.osu.cz/7atjfskripta/>

Základní informace s odkazy

<https://nano.osu.cz/7ATJF/>

(na konci jsou odkazy na úlohy ze semináře)

Multimediální encyklopedie

(staršího data, neaktualizováno – problém v novějších prohlížečích)

<http://artemis.osu.cz/mm fyz>

Téma 1

- ◆ **Atomová fyzika** 7
- ◆ **Vznik a vývoj atomové teorie** 9

Odkazy na stránky
ve skriptech

Experimentální východiska teorie

- ◆ **Základní chemické zákony** 10
- ◆ **Daltonova atomová hypotéza** 13

Téma 1

Historické modely atomu

- ◆ **Thomsonův model atomu** **14**
- ◆ **Rutherfordův model atomu** **18**
- ◆ **Bohrův model atomu** **21**
- ◆ **Sommerfeldův model (relativistický)** **26**

Téma 1

◆ **Základy kvantové teorie 33**

Východiska kvantové teorie

- ◆ Podstata elektromagnetického záření **35**
- ◆ Vyzařovací zákon (absolutně) černého tělesa **36**
- ◆ Lenardův experiment – Einsteinovo objasnění **38**
- ◆ Comptonův jev **40**
- ◆ De Broglieho vlnová hypotéza **41**

Téma 1

Základní pojmy Kvantové teorie

- ◆ Schrödingerova rovnice **47**
- ◆ Navození Schrödingerovy rovnice **48**
- ◆ Fyzikální význam vlnové funkce **52**
- ◆ Bezčasová Schrödingerova rovnice **53**
- ◆ Heisenbergovy relace neurčitosti **55**

Téma 1

- ◆ **Základy kvantové teorie** **33**
- ◆ Podstata elektromagnetického záření **35**
- ◆ Vyzařovací zákon (absolutně) černého tělesa **36**
- ◆ Lenardův experiment – Einsteinovo objasnění **38**
- ◆ Comptonův jev **40**
- ◆ De Broglieho vlnová hypotéza **41**
- ◆ Schrödingerova rovnice **47**
- ◆ Navození Schrödingerovy rovnice **48**
- ◆ Fyzikální význam vlnové funkce **52**
- ◆ Bezčasová Schrödingerova rovnice **53**
- ◆ Heisenbergovy relace neurčitosti **55**

Atomová fyzika

- ◆ **Atomová fyzika** (atomistika) je obor fyziky, který se zabývá studiem a popisem atomů.
- ◆ Původně byl zaměřen jak na oblast atomového obalu, který je tvořen elektrony (elektronový obal atomu), tak na **atomové jádro**.
- ◆ Dnes se pod tento obor zahrnuje především studium a popis elektronového obalu;
- ◆ strukturou a přeměnami atomového jádra se zabývá **jaderná fyzika** (fyzika atomového jádra, nukleonika).

Atomová fyzika

- ◆ Poznatky atomové fyziky využívají též jiné vědecké obory, například fyzika pevných látek a chemie.
- ◆ Znalost fyziky elektronového obalu je východiskem pro objasnění vzniku vazeb mezi atomy a rovněž struktury a fyzikálních vlastností látek.

Atomová fyzika

ATOM

- ◆ **Atomy** byly původně chápány jako nejmenší částice látky, jež nejsou dále dělitelné.
- ◆ Dnes přesněji říkáme, že atomy nejsou dále dělitelné chemickými postupy (využití chemických reakcí).
- ◆ Po objevu vnitřní struktury atomu a jeho jádra víme, že atomy nepředstavují základní částice látky, ale jsou pouze jednou z jejích hierarchických strukturních jednotek.

Atomová fyzika

Struktura atomu

Atomy se skládají z atomového obalu, který je tvořen elektrony (lehké, záporně nabitě částice) a **atomového jádra** (těžké kladně nabitě).

Vznik a vývoj atomové teorie

- ◆ Existenci atomů předpokládali již Leukippos (460-370 př.n.l.) a Demokritos (500-440 př.n.l.).
- ◆ Jejich úvahy ale měly čistě spekulativní charakter, jejich hypotéza tehdy ještě nebyla ověřena experimentem.
- ◆ Atomová teorie vzniká teprve na přelomu 18. a 19. století n.l.

Vznik a vývoj atomové teorie

- ◆ Mezi experimentální východiska atomové teorie patří především v té době objevené ***chemické zákony***.
- ◆ Teprve atomová teorie umožnila tyto zákonitosti vysvětlit a současně získat představu o mikroskopické stavbě hmoty.

Základní chemické zákony

- ◆ ***zákon zachování hmotnosti;***
- ◆ ***zákon zachování energie;***

poskytují výchozí pilíře pro tvorbu atomové teorie
– dávají představu o transformaci látky a energie
v chemických procesech

Základní chemické zákony

- ◆ ***zákon stálých poměrů slučovacích;***
- ◆ ***zákon násobných poměrů slučovacích;***

zejména tyto tzv. **Daltonovy zákony** , inspirovaly k formulaci atomové hypotézy – t.j. atomy jsou nedělitelná kvanta látky

Základní chemické zákony

- ◆ ***zákon stálých poměrů objemových;***
- ◆ ***zákon Avogadrův;***

přispěly k formulaci pojmu molekuly

- ◆ ***Faradayův zákon elektrolýzy***

ukazuje, že náboj ionizovaných atomů je kvantován

Základní chemické zákony

zákon zachování hmotnosti

Hmotnost všech látek do reakce vstupujících (reaktanty) je rovna hmotnosti všech reakčních produktů.

- ◆ Poprvé tento zákon formuloval Lomonosov (1748) a později nezávisle na něm Lavoisier (1774).

Základní chemické zákony

zákon zachování energie

Energii nelze vytvořit ani zničit.

- ◆ Zákon opět poprvé formuloval Lomonosov (1748), ale ve známost vstoupil až v novější nezávislé formulaci Mayerově (1842).
- ◆ Zákon **platí pro izolovaný systém**, tzn. že si systém nevyměňuje žádným způsobem energii s okolím
- ◆ Obecně se **uplatňuje se pouze pro celkovou energii systému**
- ◆ Jiné exaktnější formulace, např.:
 - neměnnost celkové energie v čase, tj. **$E(t)=konst.$** , nebo **$dE(t)/dt=0$**
 - celková energie **$E_1=E(t_1)$** částic v systému před začátkem nějakého procesu (třeba srážka částic, či chemická reakce) musí být a na konci procesu, kdy **$E_2=E(t_2)$** , musí být stejná, tj. **$E_1=E_2$**

Energie

Úkoly na seminář či na doma

- ◆ Definujte energii a uveďte její jednotku.
- ◆ Vysvětlete pojem celková, klidová, interakční resp. potenciální energie
- ◆ Definujte vztahem celkovou energii systému N-částic (obecně).
- ◆ Vysvětlete pojem relativistická částice.
- ◆ Uveďte vztah pro kinetickou energii nerelativistické a relativistické částice (jako funkci rychlosti i jako funkci hybnosti)?
- ◆ Definujte okamžitou rychlost částice a hybnost částice.
- ◆ Jak určujeme polohu částic v klasické fyzice.
- ◆ Napište celkovou energii systému N částic jako funkci a) poloh a rychlostí částic, b) poloh a hybností částic v nereletavistickém i v relativistickém případě.

Její hmotnost se nemění

$$m = m_0 = \text{konst.}$$

*Její hmotnost
funkcí
její rychlosti*

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Jednotka energie v chemii a atomové fyzice

Dříve se v chemii používal hlavně kalorie
 $1 \text{ cal} = 4185 \text{ J}$,
či její násobek kcal

- ◆ V soustavě SI je to **joule** – značka **J**
- ◆ Rozměr je $\text{N} \cdot \text{m} = (\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-2}) \cdot \text{m} = \text{kg} \cdot \text{m}^2 / \text{s}^2$
- ◆ V chemii (molekul) a atomové fyzice se používá mimosoustavová jednotka **elektronvolt** – značka **eV**
- ◆ Elektronvolt je energie, kterou získá elektron (nebo jiná částice s velikostí elementárního elektrického náboje e) napětím jednoho voltu.
- ◆ Podle zákona zachování celkové energie je v tomto případě přírůstek kinetické energie $E_{k2} - E_{k1}$ roven úbytku potenciální energie $E_{p1} - E_{p2} = Q(\varphi_{p1} - \varphi_{p2}) = Q U$.

Nebo její násobky např. keV a v jaderné fyzice MeV

Elektrický náboj

Rozdíl elektrických potenciálů je elektrické napětí U , které musí mít opačné znaménko než náboj, aby součin byl kladný

- ◆ Tedy **$1 \text{ eV} = e \cdot V = \{e\} \text{ C} \cdot \text{V} = 1,602\,176\,634 \times 10^{-19} \text{ J}$**

V soust SI symbol chápeme jako náboj e x 1 volt

Velikost elementárního elektrického náboje v coulombech

Vztah energie a hmotnosti

- ◆ U **neizolovaného systému** dochází výměna energie s okolím
- ◆ **Okolí + neizolovaný systém** mohou představovat opět **izolovaný „nadsystém“** pro nějž se celková energie v čase nemění
- ◆ Dnes víme, že vzhledem k platnosti **Einsteinova vztahu ekvivalence** mezi hmotností a energií

$$E = mc^2 ,$$

představují oba zákony (ZZE a ZZM) zákon jediný.

Změna hmotnosti při chemických reakcích

- ◆ Pokud celková energie a hmotnost systému
 - před reakcí jsou m_1 a E_1 a
 - po reakci pak m_2 a E_2 ,

odečtením máme

$$\Delta m = \Delta E / c^2,$$

kde $\Delta m = m_2 - m_1$ a $\Delta E = E_2 - E_1$.

$$c = 2,997 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$c^2 = 0,898 \cdot 10^{17} \text{ m}^2/\text{s}^2$$

- ◆ **Příklad:**

Běžná laboratorní hmotnost

- ◆ Sloučením 1 g vodíku s přibližně 8 g kyslíku na vodu se uvolní energie $1,4 \times 10^5 \text{ J}$, což odpovídá snížení hmotnosti o $1,6 \times 10^{-12} \text{ kg}$.

Dobře měřitelná energie

Tato změna hmotnosti není v běžné laboratoři měřitelná
Hmotnost se s dobrou přesností zachová

Základní chemické zákony

zákon stálých poměrů slučovacích

Hmotnostní poměr prvků či součástí dané sloučeniny je vždy stejný a nezávislý na způsobu přípravy sloučeniny.

- ◆ Zákon byl formulován nezávisle Proustem a Daltonem (1799).
- ◆ Příklad: Ve vodě je poměr hmotností kyslíku a vodíku přibližně 8.

Základní chemické zákony

zákon násobných poměrů slučovacích

Tvoří-li dva prvky více podvojných sloučenin, pak hmotnosti jednoho prvku slučujícího se vždy se stejným množstvím prvku druhého jsou pro tyto sloučeniny v poměrech, které lze vyjádřit malými celými čísly.

- ◆ Zákon byl formulován nezávisle Richterem (1791) a Daltonem (1802).
- ◆ Příklad: Kyslík, který se sloučí bezezbytku s 1 g vodíku na vodu, má hmotnost asi 8 g. Kyslík, který se sloučí bezezbytku s 1 g vodíku na peroxid vodíku, má hmotnost 16 g. Poměr hmotností kyslíku je **1:2**.

Základní chemické zákony

zákon stálých poměrů objemových

Při stálém tlaku a teplotě jsou objemy plynů vstupujících spolu do reakce, popřípadě též objemy plynných produktů reakce, vždy ve stejném poměru, který je možno vyjádřit malými celými čísly.

- ◆ Zákon formuloval Gay-Lussac (1805).
- ◆ Příklad: Kyslík s objemem 1 m^3 se bezezbytku sloučí s vodíkem o objemu 2 m^3 na vodu ve formě páry o objemu 2 m^3

Základní chemické zákony

zákon Avogadrův

Ve stejných objemech plynů či par je za stejného tlaku a teploty stejný počet molekul.

- ◆ Tento zákon formuloval Avogadro spolu se zavedením pojmu molekula.

Molekula

- ◆ Jedná o nejmenší částici látky, která má její chemické vlastnosti.
- ◆ Může být tvořena jedním, dvěma nebo více atomy. Hovoříme tak o *jednoatomové, dvojatomové* nebo *víceatomové molekule*.

Relativní atomová či molekulová hmotnost

- ◆ **Atomová hmotnostní konstanta** – m_u 1/12 hmotnosti jednoho atomu nuklidu uhlíku ^{12}C :

$$m_u = 1,660\,539\,040(20) \times 10^{-27} \text{ kg}$$

(hodnota se novými měřeními upřesňuje)

- ◆ **Relativní (též poměrná) hmotnost atomu či molekuly** m_r - hmotnost (m) atomu či molekuly vyjádřená v násobcích m_u .

$$m_r = m / m_u$$

a tedy

$$m = m_r m_u$$

Nemá rozměr

$$[m_r] = [m] / [m_u] = \text{kg} / \text{kg} = 1$$

Formálně může hrát roli mimosoustavové jednotky hmotnosti
(v SI – $[m] = \text{kg}$)

Atomová hmotnostní jednotka – značka m_u , též **u**
nebo

dalton = Da, někdy nesprávně **D**

Relativní
molekulová
hmotnost

$$m_r \equiv M_r$$

Relativní
atomová
hmotnost

$$m_r \equiv A_r$$

Poznámky k relativní hmotnosti

Volba definice atomové hmotnostní konstanty

- V jádře nuklidu ^{12}C je **12 nukleonů** (6protonů+6neutronů), m_u tak **odpovídá přibližně hmotnosti nukleonu** (proton či neutron), nebo hmotnosti jádra vodíku ($^1\text{H} = \text{proton}$), tj. i nejlehčího atomu
- Vodík je v roli standardu hmotnosti méně vhodný (plyn, izotopy)
- Při výše uvedené volbě je tedy **relativní atomová hmotnost** mnoha, zejména těch lehkých prvků, **blízká celému číslu** (dříve označované **hmotnostní číslo**), které odpovídá **počtu nukleonů v jádře atomu** příslušného prvku - tzv. **nukleonové číslo**).
- Často se tedy používá **přibližný vztah**

Relativní atomová hmotnost

$$A_r \approx A$$

Nukleonové číslo, dříve tzv. hmotnostní číslo

(zanedbání: vazebné energie, rozdílu mezi hmotnostmi protonu a neutronu, hmotnosti elektronů – **toto přiblížení nelze použít vždy**)

Definice jednotky látkového množství - vztah atomové hmotnostní konstanty a Avogadrovy konstanty

- ◆ **Množství látky** se dá určit hmotností, objemem,
nejlépe pak počtem částic (molekul, atomů).
- ◆ Běžné hmotnosti látek m_L (gramy, kilogramy) obsahují obrovské množství atomů

$$N = m_L / (m_r * m_u), \text{ tedy } N = \text{malé číslo} * (1 / m_u).$$

Vybraný dekadický násobek převrácené hodnoty m_u může představovat vhodnou jednotku množství látky představované určitým počtem částic. Látkové množství budeme vyjadřovat v násobcích takové jednotky.

- ◆ **Definice jednotky látkového množství – mol:** Jeden **mol** libovolné látky obsahuje takový počet částic $N_{1\text{mol}}$, který se rovná počtu atomů v $m_L = 12 \text{ g}$ nuklidu uhlíku ^{12}C . Pro ^{12}C je $m_r = A_r = 12$ **přesně**. Konkrétně pro $12 \text{ g } ^{12}\text{C}$ tedy platí

$$N_{1\text{mol}} = (m_L / A_r) \cdot 1 / m_u = (12 / 12) \cdot 10^{-3} \text{ kg} / (\{m_u\}_{\text{kg}} \text{ kg})$$

Počet částic –
nemá rozměr

$$= 10^{-3} / \{m_u\}_{\text{kg}} \quad (= 1 / \{m_u\}_{\text{g}})$$

Obě hmotnosti m_L i m_u
ve stejných jednotkách
např. v kg, který je
základní jednotkou v SI

- ◆ **Avogadrova konstanta N_A** – počet částic na 1 mol látky.
Musí mít tedy formálně jednotku mol^{-1} . Tedy $N_A = N_{1\text{mol}} / \text{mol}$

$$N_A = 1 / \{m_u\}_{\text{kg}} \cdot 10^{-3} \text{ mol}^{-1} = 6.022140 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Látkové množství, vztah molární a relativní atomové hmotnosti

♦ **Látkové množství** $n = N / N_A$, kde $N = m_L / (m_r \cdot m_u)$

♦ **Molární hmotnost** M – hmotnost vztažená na jednotkové množství látky, třeba 1 mol (základní jednotka v SI, možno i násobné jednotky např. kmol). Tedy pokud látka má hmotnost m_L , která představuje látkové množství n .

$$M = m_L / n.$$

Platí tedy

$$M = (m_L / N) \cdot N_A = (m_L / m_L) \cdot m_r \cdot m_u \cdot N_A = m_r \cdot \{m_u\}_{\text{kg}} \text{ kg} (1 / \{m_u\}_{\text{kg}}) \cdot 10^{-3} \text{ mol}^{-1}$$

$$N_A = 1 / \{m_u\}_{\text{kg}} \cdot 10^{-3} \text{ mol}^{-1}$$

$$M = m_r \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol} (= m_r \cdot \text{g/mol})$$

$$\{M\}_{\text{g/mol}} = m_r$$

Faktor 10^{-3} je důsledek definice základní jednotky **mol** a skutečnosti, že jsme použili **kg** jako základní jednotku hmotnosti v SI

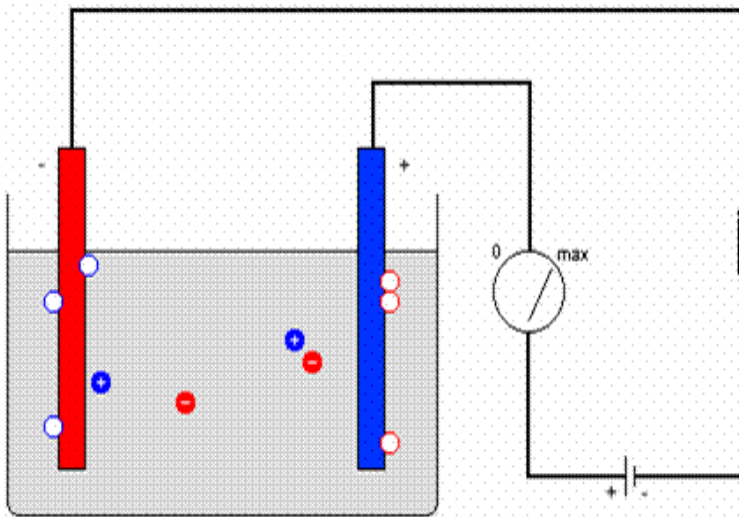
Pro přibližné výpočty v chemii se používá aproximace $A_r \approx A$ u atomů, resp. $M_r \approx \Sigma A$ u molekul, ale v jaderné fyzice by to vedlo k nežádoucímu zanedbání hmotnostního úbytku

Základní chemické zákony

Faradayův zákon elektrolýzy

Hmotnost látky m přeměněné při elektrolýze na elektrodě je úměrná prošlému náboji Q : $m = A_{ee} Q$, kde A_{ee} (obvykle znač. A) je **elektrochemický ekvivalent** (pro danou látku konstanta).

$Q = I \cdot t$, kde I je el. proud obvodem a t čas



Na základě atomistických představ (přeneseno N iontů)

$$A_{ee} = m/Q = N \cdot m_r \cdot m_u / (N \cdot Z_i \cdot e)$$

$$A_{ee} = m_r \cdot m_u / (Z_i \cdot e)$$

poměr hmotnosti a náboje iontu

Z_i – stupeň ionizace

e – elementární elektrický náboj

Daltonova atomová hypotéza

Postuláty atomové teorie

- ◆ prvky se skládají z velmi malých dále **nedělitelných částic – atomů**,
- ◆ atomy téhož prvku jsou stejné, atomy různých prvků se liší hmotností, velikostí a dalšími vlastnostmi,
- ◆ v průběhu chemických dějů se atomy spojují, oddělují nebo přeskupují, přičemž ale nemohou vznikat nebo zanikat,
- ◆ slučováním dvou či více prvků vznikají **chemické sloučeniny**, které vznikají spojením celistvých počtů atomů.

Vývoj modelů struktury atomů – snaha objasnit experimentální spektra atomů

- ◆ **Daltonova atomová hypotéza** dobře vysvětlovala pozorované chemické zákonitosti.
- ◆ Z pohledu fyziky bylo třeba objasnit **vnitřní strukturu**, stavbu, dynamiku a energetické stavy atomů, které jsou v přímé souvislosti s pozorovaným **spektrém elektromagnetického záření** (vyzařuje se při deexcitaci atomu nebo naopak pohlcuje při jeho excitaci).
- ◆ Atomy vyzařují či pohlcují elektromagnetické záření (viditelné, IČ, UF, RTG), ale pouze na vybraných vlnových délkách (pozorujeme **tzv. čárové spektrum**), které jsou pro atom konkrétního prvku charakteristické.

Objev elektronu

- ◆ V polovině 19. století pozoroval Geissler a další fyzikové tzv. **katodové paprsky**.
- ◆ **Katodová trubice** (exp. Plücker, Geissler aj.)
- ◆ Uvnitř velmi nízký tlak (<1000 až1 Pa)
- ◆ Napětí vyšší než 1000 V
- ◆ Část trubice naproti katodě září při nejnižších tlacích
- ◆ předpoklad emise **katodového záření** (W. Crooks 1870)
- ◆ Thomson objasnil – katodové záření je proud částic se záporným nábojem $-e$. Označují se jako **elektrony** (pojmenování Stoney 1900) .

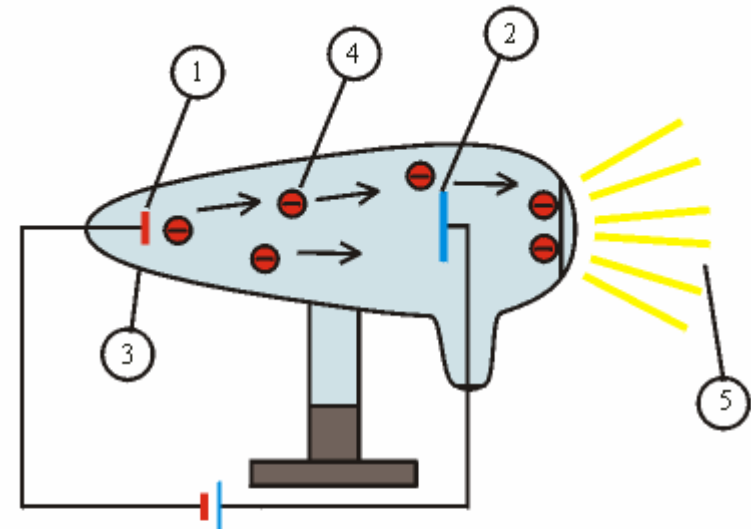


Schéma katodové trubice:

- 1 katoda,
- 2 anoda,
- 3 skleněná trubice s plynem o nízkém tlaku,
- 4 elektrony emitované katodou,
- 5 viditelné záření ("světélkování", fluorescence) emitované po dopadu elektronů na stěnu trubice.

e – elementární el. náboj - změřený např. v Millikanově experimentu

- ◆ $1,602\ 176\ 634 \times 10^{-19}$ C (od r. 2019 – je do definiční hodnota)

Elementární elektrický náboj

Millikanův pokus

- ◆ **Millikan** (1910-1913)
- ◆ Elektrody – vysoké napětí (asi 1000 V)
- ◆ Kapičky oleje mohou být ionizovány ultrafialovým zářením
- ◆ Levitace kapiček v důsledku rovnováhy elektrické a gravitační síly (opačný směr, ale stejná velikost). Pro složky z platí:

$$F_{e,z} + F_{g,z} = 0 \quad \rightarrow \quad q = \frac{dmg}{U}$$

- ◆ Náboj určený dle vztahu vlevo nabýval pouze celistvých násobků

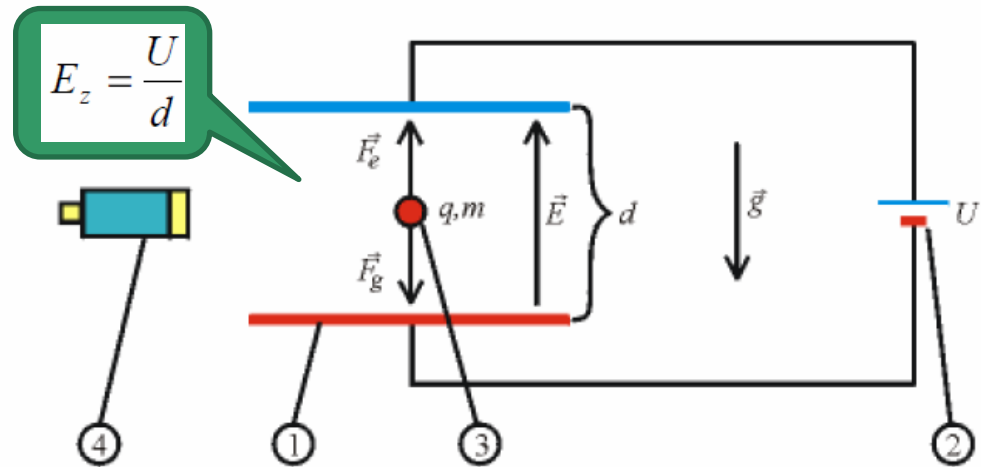


Schéma Millikanova experimentu:

- 1 rovinné elektrody,
- 2 zdroj napětí,
- 3 nabitá částice,
- 4 pozorovací mikroskop.

$$F_{e,z} = qE_z \quad F_{g,z} = -mg$$

Veličiny v obrázku: U - elektrické napětí, d - vzdálenost elektrod, \vec{E} - elektrická intenzita, q - elektrický náboj částice, m - hmotnost částice, \vec{g} - gravitační zrychlení. Při vhodně zvoleném napětí elektrická síla \vec{F}_e přesně kompenzuje gravitační sílu \vec{F}_g a částice se vznáší "levituje".

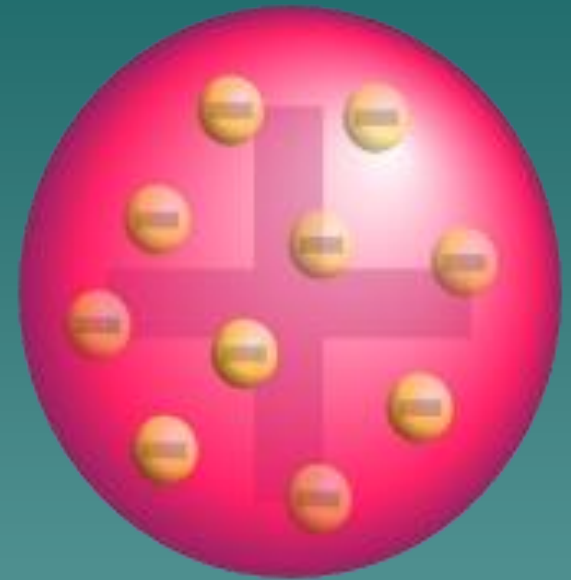
Hmotnost kapičky m lze určit z hustoty oleje po jeho vynásobení objemem kapičky, který se určí z jejich geometrických rozměrů změřených rastrovým mikroskopem.

Thomsonův model atomu (pudinkový)

Na základě objevu elektronu, lehké částice se záporným elektrickým nábojem, která může být emitována elektroneutrálním atomem, navrhl Thomson první model struktury atomu.

Lehké záporně elektricky nabité **elektrony** jsou umístěny **v rovnovážných polohách v kladně el. nabitě spojitě látce** (ta představuje většinu hmoty atomu). Později doplněny i první představy o uspořádání elektronů v atomech do vrstev, které mají souvislost s chem. vlastnostmi.

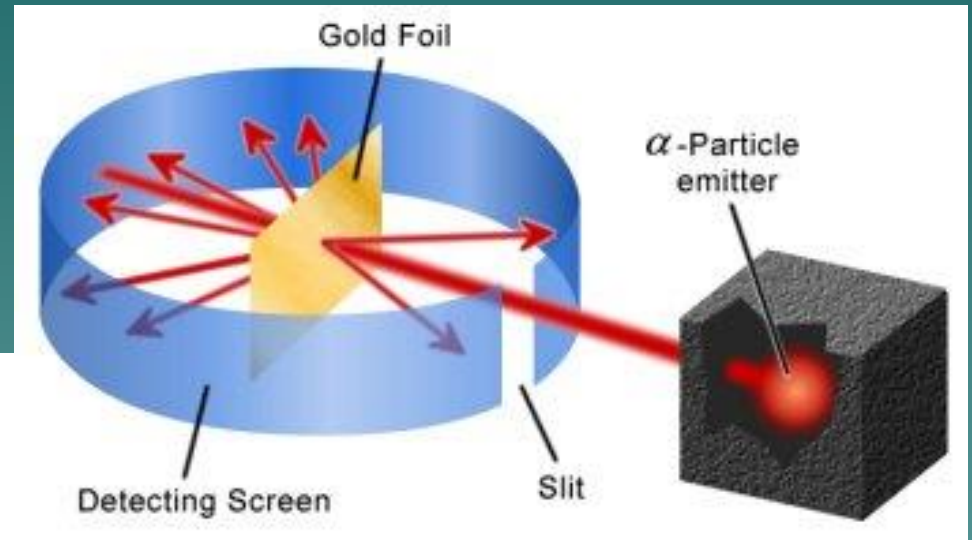
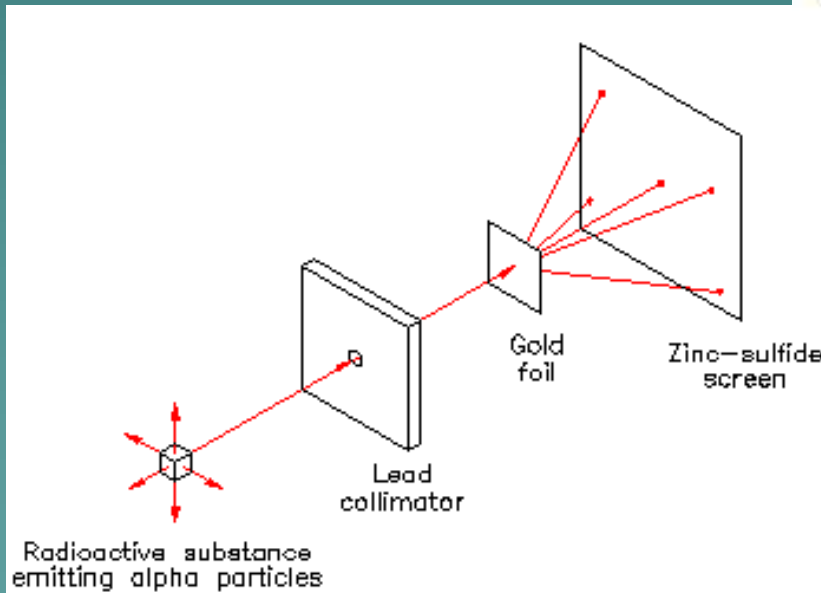
Pro atom vodíku, ale výpočty frekvencí kmitů elektronů (kmitající náboj = pulsující dipól = zdroj elmg. vlnění) neodpovídaly experimentálně pozorovaným frekvencím elmg. záření



V případě **atomu vodíku** měl být elektron v rovnovážné poloze ve středu nabitě koule

Rutherfordův model atomu

Rutherfordův experiment



Rutherfordův model atomu

(planetární)

Na základě rozboru rozptylových experimentů (Rutherfordův pokus) usoudil Rutherford (roku 1911), že

- ◆ atomy mají jádro, které má kladný elektrický náboj,
- ◆ připadá na ně téměř celá hmotnost atomu.
- ◆ Na rozdíl od Thomsonova modelu atomu však musí toto jádro zaujímat pouze malou část objemu atomu

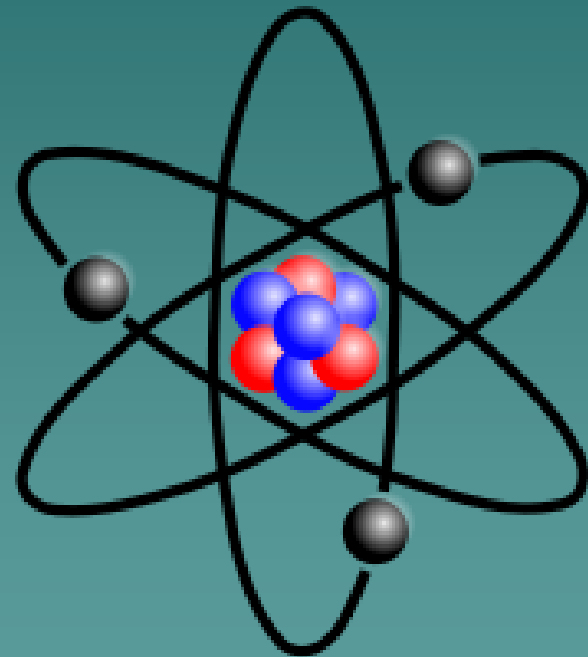
(lineární rozměr jádra 10^{-14} až 10^{-15}m).

To je asi desettisíckrát až stotisíckrát menší než lineární rozměr atomu

(ten je řádově 10^{-10}m).

Rutherfordův model atomu

- ◆ Tento model atomu již odpovídá, alespoň pokud jde o vnitřní složení atomu, současným poznatkům:
- ◆ Malé těžké a kladně nabitě jádro v centru atomu
- ◆ Lehké záporně nabitě elektrony okolo

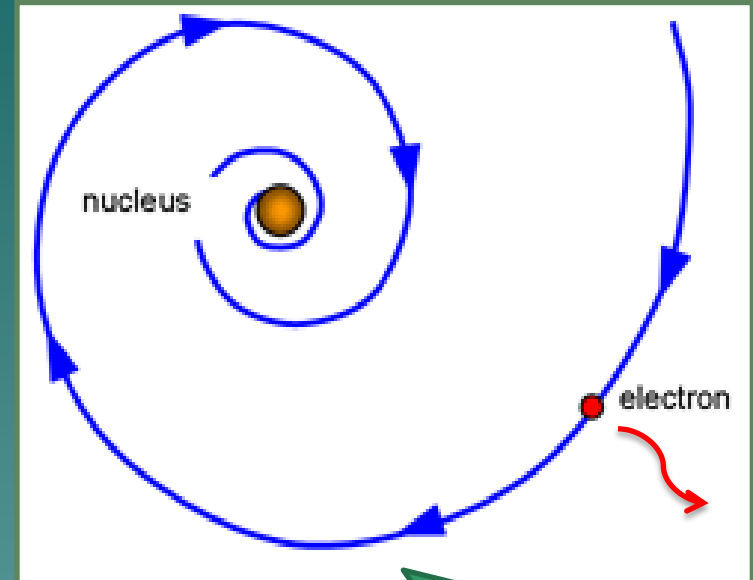


Rutherfordův model atomu

NEDOSTATKY MODELU

Model **nesprávně** popisuje dynamiku (vnitřní pohyb) atomu.

- ◆ Aplikace zákonů klasické fyziky vedly k **nesprávné předpovědi** nestabilního atomu.
- ◆ Elektrony ve zlomcích sekundy měly spadnout do jádra.



Klasická elektrodynamika

nabitá částice pohybující se se zrychlením vyzařuje energii ve formě elmg. záření

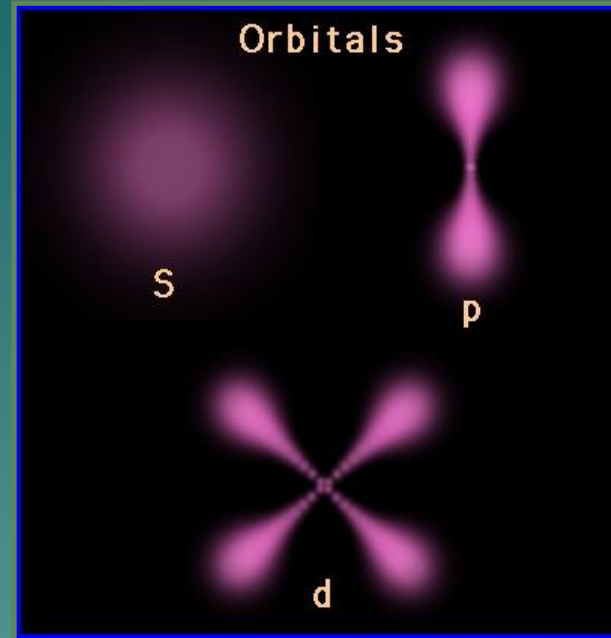
Kolaps atomu v čase řádově 10^{-10} s.

Rutherfordův model atomu

Z pohledu nových fyzikálních teorií však nelze určit přesnou dráhu elektronu, jak si to představoval Rutherford, ale jen pravděpodobnost jeho výskytu – „elektronový oblak“

- viz kvantová teorie.

Spektrum energií v modelu a tudíž i **elmg. spektrum je spojité** (odporuje experimentu, z nějž plyne čárové elmg. spektrum a diskrétní energetické spektrum)



$$E = E_{\text{Kinetická}} + E_{\text{Potenciální}} = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Dostředivá síla

$$F_d = \frac{m_e v^2}{r}$$

$$F_d = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$m_e v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Poloměr dráhy je libovolný
ENERGIE SE MĚNÍ SPOJITĚ

Bohrův model atomu

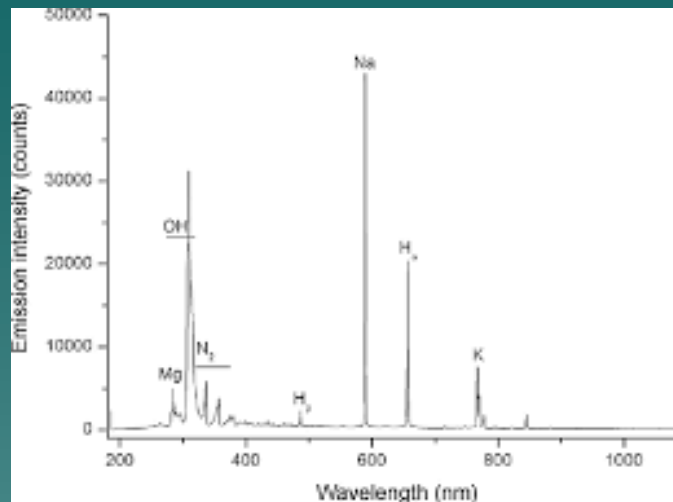
(úvod – spektra látek)

Absorbční a emisní spektra látek

- ♦ Látky mohou vyzařovat (**emise**) nebo pohlcovat (**absorpce**) elektromagnetické záření.

Spektrum

emisní (resp. absorpční) elektromagnetické spektrum látky, je **závislost intenzity I** elmg. záření vyslaného (resp. pohlceného) látkou **na jeho frekvenci (kmitočtu) ν**



Příklad
emisního spektra

Intenzita elmg. záření I

← Též intenzita vyzařování či ozařování, či (plošná) hustota zářivého toku

- **zářivý tok** vztažený na jednotkovou plochu (**jednotka W/m^2**)

energie emitovaná či absorbovaná za jednotku času (**jednotka W**)

- ♦ Místo intenzity to může být **závislost jiné veličiny s touto intenzitou jednoznačně spojené** (např. absorpčního koeficientu, či počet emitovaných fotonů – „count“)
- ♦ Místo frekvence to může být **závislost na jiné veličině s touto frekvencí jednoznačně spojené**, např. závislost na
 - úhlové frekvenci $\omega = 2\pi \nu$,
 - vlnové délce $\lambda = c/\nu$,
 - vlnočtu $\tilde{\nu} = 1/\lambda$ vln (nezaměnit s kmitočtem $\nu = c/\lambda$)
 - vlnovém čísle (velikosti vlnového vektoru, úhlovém vlnočtu) $k = 2\pi / \lambda$
 - energii $E = h \nu$.

Bohrův model atomu

- ◆ **Spojité spektrum.** Intenzita záření v celém rozsahu frekvencí není nikde nulová.
- ◆ **Pásové spektrum.** Ve spektru existují intervaly frekvencí, pro které je intenzita nulová, ve zbývajících intervalech je pak nenulová (Ve spektrometru pozorujeme pásy.)
- ◆ **Čárové spektrum.** Ve spektru existují frekvence, pro které je intenzita nenulová. Pro ostatní frekvence je intenzita nulová. (Ve spektrometru pozorujeme čáry odpovídající příslušným frekvencím).

Při grafickém znázornění posledních dvou typů spekter se často místo grafu intenzity používá schematické **zakreslení nulových a nenulových hodnot intenzit** emitovaného či pohlceného záření.

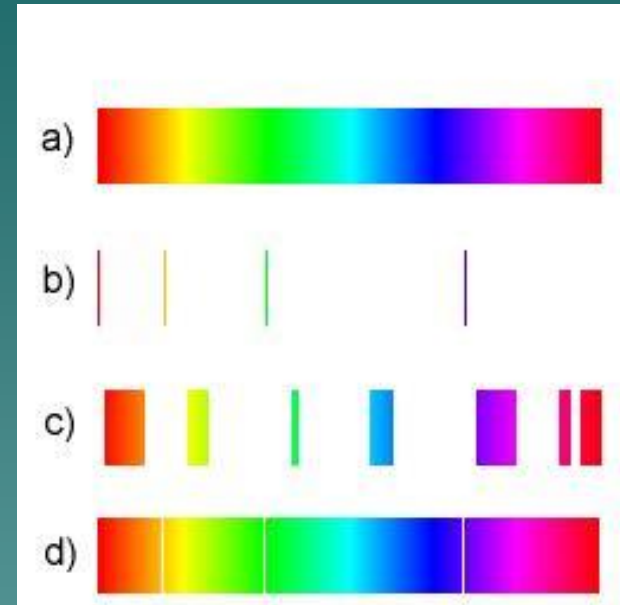
Takové zobrazení odpovídá pohledu na dříve hojně používaný záznam spektra na fotografické emulzi po vyvolání.

Bohrův model atomu

Experimentálně pozorovaná spektra

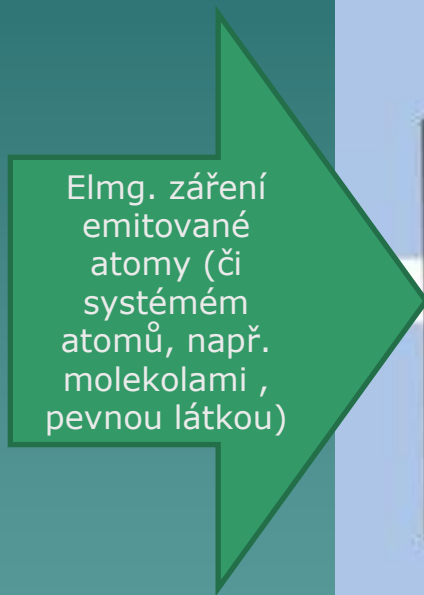
Nejdříve byla **proměřena optická spektra**, později též další oblasti elmg. spektra.

- ◆ **Čárové spektrum atomů**
- ◆ **Pásové spektrum molekul v infračervené oblasti**
- ◆ **Spojité optické spektrum pevných látek**



- a) spojité spektrum
- b) čárové (emisní) spektrum
- c) pásové spektrum
- d) absorpční čárové spektrum
(ve spektrometru tmavé čáry na pozadí spojitého spektra)

Spektrometr

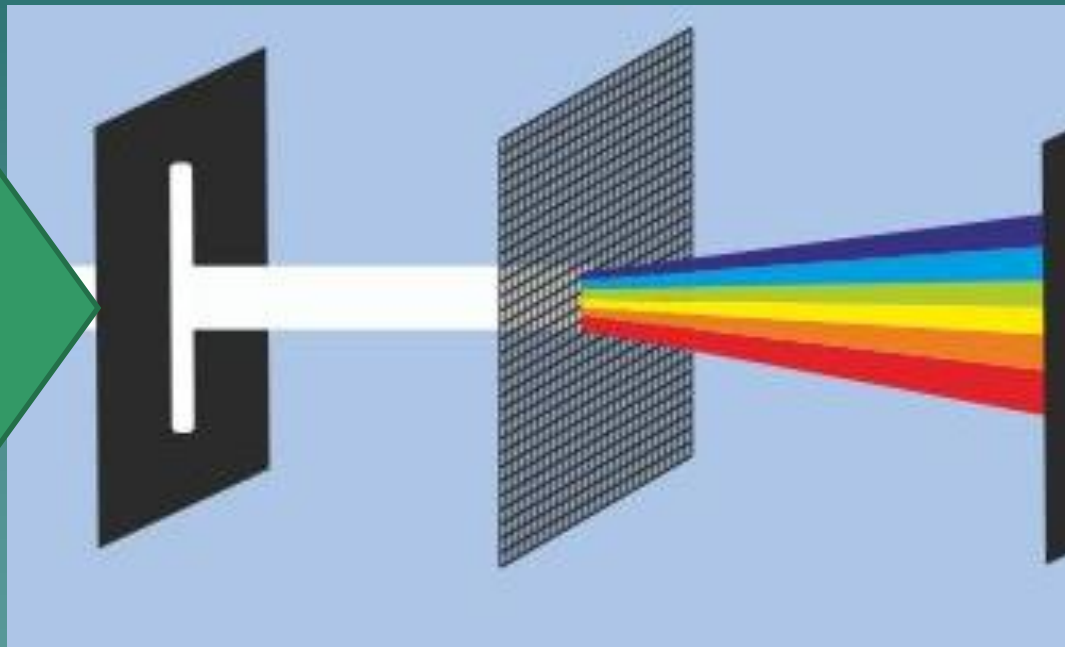


Elmg. záření emitované atomy (či systémem atomů, např. molekulami, pevnou látkou)

štěrbina

mřížka či hranol

film nebo fotodetektor

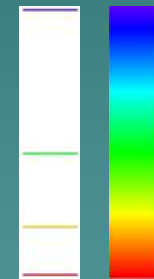


Kolimace (formování) záření

Difrakce (ohyb) záření

Detekce (záznam) záření

Příklady záznamu

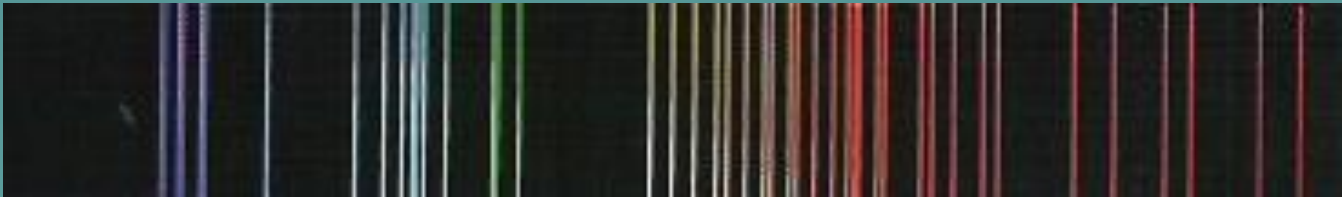


Poloha v záznamu odpovídá vlnové délce

Bohrův model atomu

Čárové spektrum atomů.

- ◆ V případě volných atomů (např. v plynu) bylo zjištěno, že jejich optická spektra jsou čárová.
- ◆ Později bylo zjištěno, že pro atomy pozorujeme čárové spektrum i v dalších oblastech elmg. spektra.
- ◆ Toto spektrum nedokázal Rutherfordův model, ani jiné v té době známé teorie, objasnit.



Bohrův model atomu

- ◆ Aby Bohr odstranil hlavní nedostatky Rutherfordova modelu, postuloval platnost tzv. ***kvantovací podmínky***,
- ◆ Tuto podmínku nebylo možno získat ze základních zákonů klasické fyziky.
- ◆ Bohr v roce 1913 navrhuje svůj model atomu vodíku.
- ◆ Model je použitelný i pro tzv. vodíku podobné ionty.

Bohrův model atomu

Postuláty modelu

- ◆ Elektroný se pohybují jen po kruhových drahách, pro které je splněna **kvantovací podmínka**:

$$2\pi m r v = n h$$

Zde m je hmotnost elektronu, r poloměr kruhové dráhy a v je rychlost elektronu;

- ◆ veličina n ($=1, 2, 3\dots$) se označuje jako **kvantové číslo** a h je Planckova konstanta.

Bohrův model atomu

Postuláty modelu

- ◆ Elektrony při pohybu po drahách splňujících kvantovací podmínku **nevyzařují energii**.
- ◆ Energie může být vyzářena, resp. přijata, pouze při **přechodu elektronu** z jedné dráhy na druhou

Bohrův model atomu

výpočet spektra

Dvě rovnice o dvou neznámých r a v

Kruhový pohyb elektronu kolem jádra v důsledku elstat. interakce, srovnej výpočet u Rutherfordova modelu atomu

$$m_e v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$2\pi m_e r v = nh$$

Kvantovací podmínka

Škrtnutá resp. **redukovaná** Planckova konstanta, někdy též **Diracova konstanta**

Konstanty pro zjednodušení výpočtu

$$\hbar = h / 2\pi \quad \text{a} \quad e_0^2 = e^2 / 4\pi\epsilon_0$$

řešení

$$v_n = \frac{e_0^2}{\hbar} \cdot \frac{1}{n} \quad \text{a} \quad r_n = \frac{\hbar^2}{m_e e_0^2} \cdot n^2$$

Kvantovací vztah pro velikost rychlosti a poloměr

Po dosazení řešení do vztahu pro celkovou energii

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e e_0^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Kvantovací vztah pro celkovou energii atomu resp. elektronu v poli jádra

Bohrův model atomu

základní energetický stav a Bohrův poloměr atomu

- ◆ Nejnižší (záporná !) energie je pro $n = 1$

$$E_1 = -\frac{1}{2} \frac{m_e e_0^4}{\hbar^2}$$

Základní stav atomu vodíku
 $E_1 = -13.6 \text{ eV}$

$$\hbar = h/2\pi \text{ a } e_0^2 = e^2/4\pi\epsilon_0$$

- ◆ Základnímu stavu odpovídá nejmenší poloměr dráhy

$$a_0 \stackrel{DEF}{=} r_1 = \frac{\hbar^2}{m_e e_0^2}$$

Bohrův poloměr atomu (vodíku)
 $a_0 = 5,2917709 \cdot 10^{-11} \text{ m.}$

Pojem se zobecňuje i pro jiné **vodíku podobné atomy** či ionty (v jádře **Z** protonů a jen jeden elektron v obalu.

$$Ze_0^2 \leftrightarrow e_0^2$$

Opravu na nenulovou hmotnost jádra m_J lze provést náhradením hmotnosti elektronu m_e jeho **redukovanou hmotností** μ .

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_J}$$

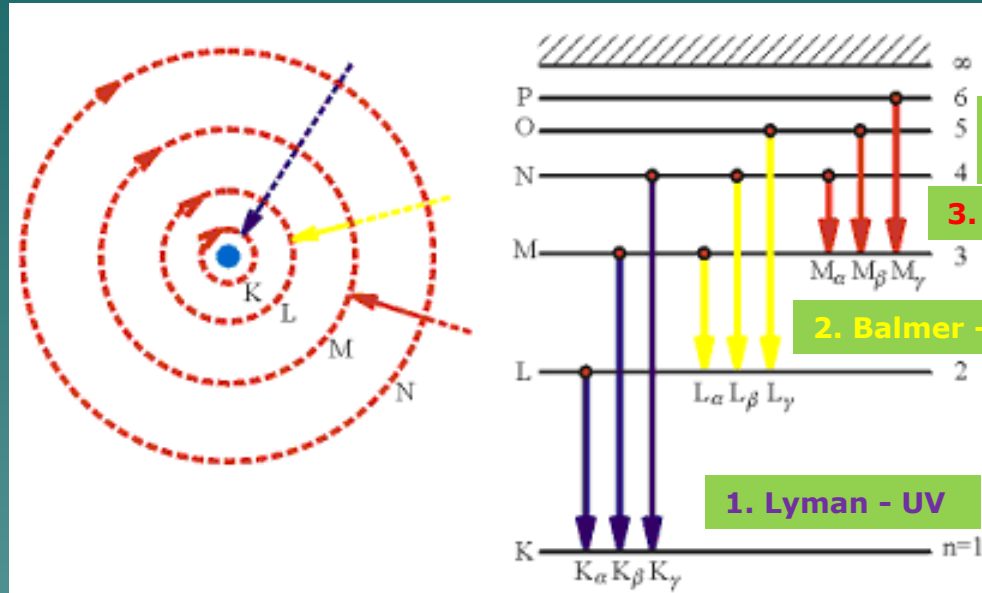
Bohrův model atomu

- Model principiálně **objasňuje vznik čárového spektra atomů**
- Zhruba předpovídá spektrum atomu vodíku
- Nedokázal ovšem objasnit jemnou strukturu** tohoto spektra (při vyšším rozlišení spektrometru vidíme místo jedné čáry někdy více čar)

Energie fotonu je rovna rozdílu energetických hladin atomu

$$\omega = \frac{E_f}{\hbar} \quad (\text{pro kmitočet } \nu = \frac{E_f}{h})$$

$$\omega_{ij} = -\frac{1}{2} \frac{m_e e_0^4}{\hbar^3} \left(\frac{1}{j^2} - \frac{1}{i^2} \right)$$



Bohrův model atomu

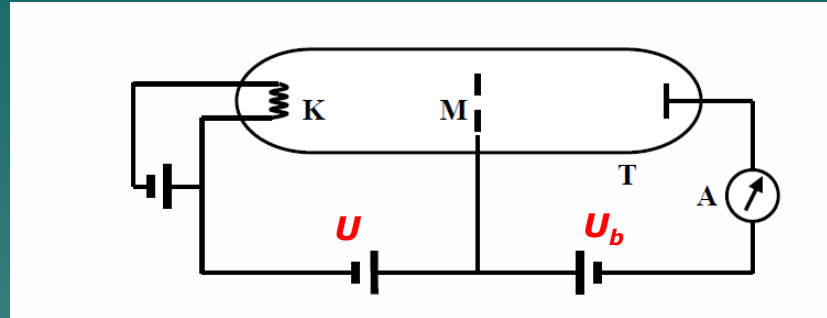
Vlevo jsou znázorněny dovolené kruhové dráhy elektronu. Vpravo jsou jim odpovídající hladiny energie (energetické spektrum). Na obou schématech jsou znázorněny šipkami přechody atomů odpovídající spektrálním čárám. Rozlišujeme série čar: K neboli Lymanovu (modře), L neboli Balmerovu (žlutě), M neboli Paschenovu (červeně) a další.

$$\left(\frac{1}{\lambda_{ij}} \right) = -R \cdot \left(\frac{1}{j^2} - \frac{1}{i^2} \right), \quad \text{kde } R = \frac{1}{2} \frac{m_e e_0^4}{\hbar^3 2\pi c} = \frac{1}{8} \frac{m_e e^4}{\epsilon_0^2 h^3 c} \text{ je Rydbergova konstanta.}$$

Francův-Hertzův pokus

- potvrzení kvantování energie v atomech

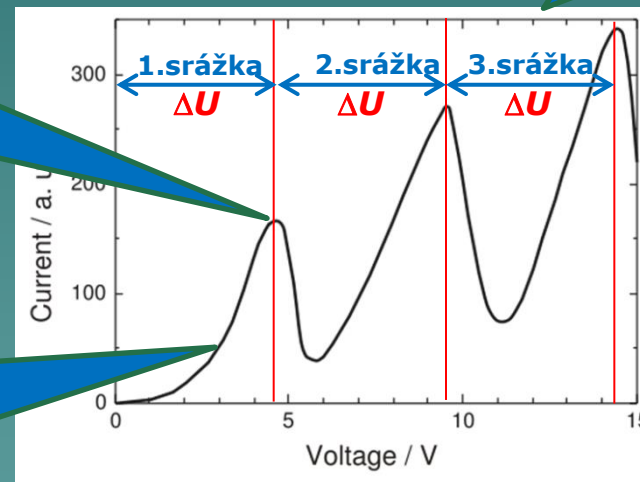
- Triodu T plnili Franck a Hertz parami různých prvků.
- Ze žhavené katody K vystupují elektrony a jsou unášeny elektrickým polem ke kladně nabitě mřížce M.
- Potenciálový rozdíl mezi katodou a mřížkou označme symbolem U .
- Mezi mřížkou a anodou je slabé brzdící napětí U_b (projdou jen elektrony s určitou minimální kin energií).
- Elektrony se srážejí s atomy par vyplňujících vnitřní prostor triody - srážky mohou být jak pružné, tak i nepružné (mění se energie atomu o ΔE).



Elektron s dostatečnou kin. energií ji může předat ještě po několika srážkách s dalšími neexcitovanými atomy

ZAČÁTEK NEPRUŽNÝCH SRÁŽKA EL.
⇔
EXCITACE ATOMŮ

PRUŽNÉ SRÁŽKY EL. NA ATOMU,
 $m_e \ll m_{atom}$
=> kin. energie elektronu se téměř nemění



Původní Franckův-Hertzův graf (v pozadí) pro rtuť s $\Delta U = 4,9 \text{ V}$

ΔE – rozdíl mezi základním a 1.excitovaným stavem atomu

$$\Delta U = \Delta E / e$$

Právě při hodnotě napětí $U = \Delta U$ se atom excituje na úkor snížení energie elektronu při jeho první srážce, ten pak nemá dost energie na překonání brzdícího napětí U_b
=> klesá proud I

Tato situace se opakuje při případných dalších srážkách elektronu, proud klesá pro $U = k \cdot \Delta U$, kde k je přirozené číslo

Sommerfeldův model atomu

(eliptické dráhy)

- ◆ Sommerfeld se pokusil objasnit **jemnou strukturu spekter** představou oběhu elektronů po **eliptických drahách**.

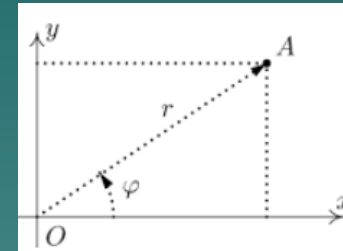
Polohu částice v rovině oběhu lze určit pomocí polárních souřadnic

$$x = r \cos \varphi$$

$$y = r \sin \varphi$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$\varphi = \arctg\left(\frac{y}{x}\right)$$



Bohrův model

Na kružnici je pevné r , mění se φ

1 stupeň volnosti φ
pro dané r

Bohrova
kvantovací
podmínka

Kvantovací vztah
 $E_n = E(n)$

1 kvantovací podmínka
ve výsledku určující dovolené r

HYPOTÉZA
Mírně odlišné energie pro stejné n ale různé l by mohly vysvětlit existenci blízkých čar

Sommerfeldův model

Na elipse se mění r a φ

2 stupně volnosti r, φ

Zobecněná
kvantovací
podmínka

Kvantovací vztah
 $E = E(n_r, n_\varphi) = E(n, l)$

2 kvantovací podmínky
ve výsledku určující poloosy elipsy a, b

$$n = n_r + n_\varphi$$

$$l = n_\varphi$$

Sommerfeldův model atomu

(zobecněná kvantovací podmínka)

- Bylo nutné vyjít z **kvantovacích podmínek** zobecněných pro případ obecných drah elektronů, tzv. **Sommerfeldovy-Wilsonovy kvantovací podmínky**.

Křivkový integrál
(integrujeme po trajektorii)

$$\oint p_k dq_k = n_k h.$$

Planckova konstanta

Kvantové číslo

Zobecněná hybnost sdružená
s obecnou souřadnicí

Obecná
souřadnice

Pro polární souřadnice:

- $q_k = r, \varphi$
- $p_k = p_r, p_\varphi$ - konkrétní tvar se odvodí z aparátu **teoretické mechaniky**
- $n_k = n_r, n_\varphi$

Definice
zobecněné
hybnosti

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}$$

Lagrangeova funkce

– rozdíl celkové kinetické a celkové potenciální energie soustavy vyjádřené jako funkce zobecněných souřadnic a rychlostí

$$L = T(q_1, q_2, \dots, q_m, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_m, t) - U(q_1, q_2, \dots, q_m, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_m, t)$$

Sommerfeldův model atomu

(nerelativistické řešení)

Moment hybnosti

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

$L = konst_t$
Integrál pohybu – L se zachovává

$$p_\varphi = r.m.r.(d\varphi/dt) = r.m.v.\sin(\alpha) = L$$

$p_\varphi = L = konst_\varphi$

$$\int_0^{2\pi} p_\varphi d\varphi = n_\varphi h$$

$$\int_{r_{min}}^{r_{max}} p_r dr = n_r h$$

$2\pi L = n_\varphi h$

„Složitější výpočty“

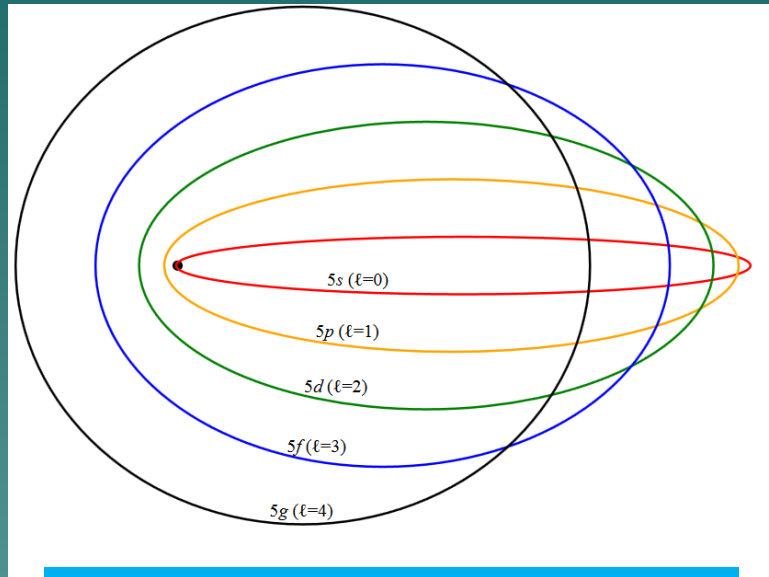
Shodné s Bohrovou podmínkou, kde pro kruhovou drahu ($\alpha = \pi/2, r, v = konst_t$):

$2\pi mrv = n_\varphi h$

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e e_0^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

$n = n_r + n_\varphi$
 $l = n_\varphi$

Hlavní kvantové číslo $n = 1, 2, 3 \dots$
Vedlejší kvantové číslo $l = 0, 1, 2, 3 \dots, n-1$



Vybrané dovolené eliptické dráhy

Nerelativistický Sommerfeldův výpočet dává spektrum shodné s Bohrovým modelem !!!

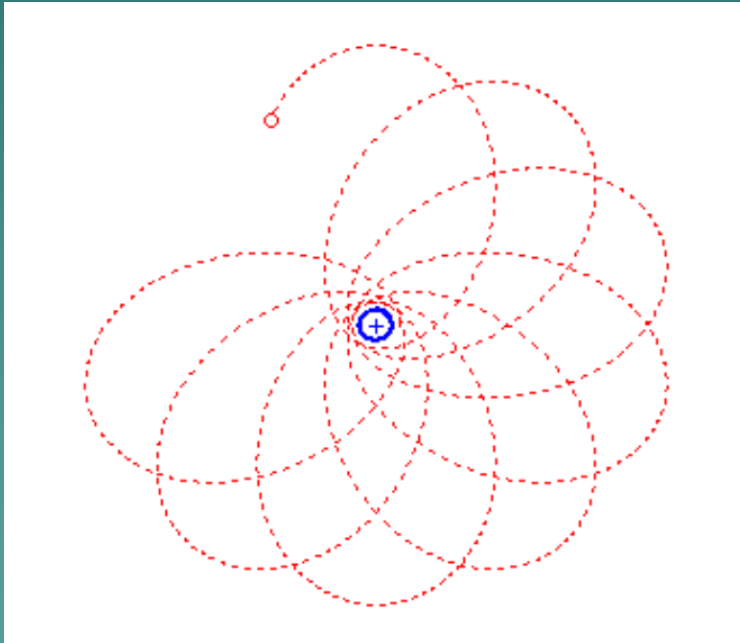
$E(n)$ - degenerace v / tj. různá l mají pro dané n stejnou energii

Hypotéza o závislosti energie na l se nepotvrzuje

Sommerfeldův model atomu

uvážení důsledků teorie relativity

- ◆ V důsledku relativistické změny hmotnosti se stáčí dráha elektronu (vytváří růžici)



$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Na eliptické dráze se mění rychlost a podle teorie relativity tedy i hmotnost elektronu

Celková energie

$$E = mc^2 + U = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} + U(r)$$

Relativistické vztahy pro celkovou energii částice vázané v potenciálu U

1. Člen ve výrazech – tvar energie volné částice (zahrnují klidovou a „relativistickou“ kinetickou energii)

2. Člen ve výrazech

Elektrostatická potenciální energie je stejně jako v případě nerelativistické teorie rovna mechanickému potenciálu

$U = Q \cdot \varphi$, kde Q (zde náboj elektronu) je elektrický náboj částice a φ elektrický potenciál v němž se částice nachází (zde elektrostatický coulombický potenciál jádra, který je nepřímo úměrný vzdálenosti od jádra r).

Sommerfeldův model atomu

výsledek relativistického výpočtu

- ♦ V rámci **relativistického řešení** spektrum atomu vodíku **částečně** objasňuje **jemnou strukturu spekter**.

Kvantovací vztah

$$E_{n,l} = m_0 c^2 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n_r + \sqrt{n_\varphi^2 - (Z\alpha)^2} \right)^2} \right]^{\frac{1}{2}} \doteq \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n \cdot l} \right)}}$$

Konstanta jemné struktury

$$\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{e^2}{2\epsilon_0 \hbar c} \doteq \frac{1}{137}$$

Hlavní kvantové číslo $n = 1, 2, 3 \dots$

$$n = n_r + n_\varphi$$

Vedlejší kvantové číslo $l = 0, 1, 2, 3 \dots, n-1$

$$l = n_\varphi$$

Teprve relativistický výpočet potvrzuje původní předpoklad
– degenerace energie v l je sejmuta (E závisí na l) =>
více blízkých hladin energie a tedy i **více blízkých čar ve spektru**

Sommerfeldův model atomu

některé nedostatky modelu

- ◆ Model nedokázal např. objasnit **dublety** (dvojice blízkých čar) u atomu vodíku, které souvisí s existencí **spinu** elektronu.
- ◆ Ukázalo se, že představa pohybu elektronu s určitou hybností po **určité** dráze je neudržitelná, viz též **Heisenbergovy relace neurčitosti**.
 - Proto se kvantová teorie rozvíjela na bázi vlnových rovnic a modely na bázi **Sommerfeldovy kvantové teorie** se dále nerozvíjely.
- ◆ Energetické spektrum získané na základě Sommerfeldova modelu zahrnuje z **relativistických korekcí** pouze **relativistickou hmotnostní korekci**.
 - Spektrum je analogické se spektrem získaným řešením **Kleinovy-Gordonovy rovnice**, což je relativistická vlnová rovnice, nezahrnující spin částic.

Základy kvantové teorie

- ◆ Ukázalo se, že modely atomů založené pouze na představách a zákonech klasické fyziky jsou nedostačující.
- ◆ ***Thomsonův*** i ***Rutherfordův model*** jsou v rozporu s některými experimentální fakty.
- ◆ Tyto modely neuspěly zejména při objasnění čárových spekter atomů.

Základy kvantové teorie

- ◆ **Bohrův model** atomu a jeho rozšíření v podobě **Sommerfeldova modelu atomu** využívají zákonitosti a pohybové rovnice klasické fyziky doplněné o nový postulát, který požaduje splnění kvantovacích podmínek.
- ◆ Tyto **podmínky navržené** poprvé čistě účelově (**ad hoc**) pro atom vodíku **Bohrem** (později byly **zobecněny Sommerfeldem a Wilsonem**).
- ◆ Na druhou stranu ale naznačily, že původní klasická teorie musí být nahrazena obecnější teorií – **teorií kvantovou**.

Základy kvantové teorie

POZOR

- ◆ Samozřejmě, že všechny postupy a zákony klasické fyziky nejsou zatraceny, ale musí být zahrnuty do této nové kvantové teorie jako speciální případ.

Základy kvantové teorie

východiska kvantové teorie

- ◆ *čárové spektrum atomů – kvantovací podmínka*
- ◆ objev *kvantové povahy elmg. záření – zavedení pojmu foton*
- ◆ představa *korpuskulárně vlnového dualismu* pro elmg. záření
- ◆ *de Broglieho vlnová hypotéza* - difrakce elektronů

Základy kvantové teorie

Fyzikální podstata elektromagnetického záření

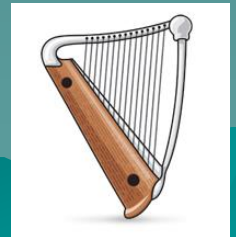
- ◆ Původní (nekvantový) klasický popis předpokládá, že se jedná o vlnění elektromagnetického pole ve vakuu
- ◆ Elektromagnetické pole se popisuje pomocí vektorů **elektrické intenzity** a **magnetické indukce** (alternativně **skalárním a vektorovým potenciálem**), které získáme řešením Maxwellových rovnic, v nichž jako parametr vystupuje hustota elektrického náboje a elektrického proudu
- ◆ Obecně jsou tyto vektory (či jim odpovídající potenciály) a parametry funkcemi času a polohy v prostoru
- ◆ Nenulové (netriviální) řešení Maxwellových rovnic je možno získat i ve vakuu

Základy kvantové teorie

Úkoly:

- ◆ Zopakujte si definice základních veličin z používaných v elektřině a magnetismu, či v teorii elektromagnetického pole: **elektrický náboj, hustota elektrického náboje, elektrický proud, hustota elektrického proudu, elektrická intenzita a magnetická indukce, elektrický potenciál a vektorový potenciál mag. pole, elektrická permitivita a magnetická permeabilita.**
- ◆ Připomeňte si jejich **jednotky** a uveďte zda konkrétní veličina je **vektor** či **skalár**.
- ◆ Napište vztahy pro sílu působící na náboj v elektrickém poli (popsané intenzitou el. pole) a na pohybující se náboj v magnetickém poli (popsané indukcí mag. pole). Pozn.: Ze vztahů vychází definice obou veličin.
- ◆ Zopakujte si definici a význam **skalárního a vektorového součinu**.
- ◆ Zopakujte si definice základních diferenciálních operátorů (symbolů) **nabla, Laplaceův operátor, gradient, rotace, divergence**. Uveďte jejich vzájemné souvislosti.

Nabla -
strunný
hudební nástroj



Základy kvantové teorie

klasický = vlnový popis elmg. záření

Maxwellovy rovnice

$$\nabla \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \vec{B} = 0$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Maxwellovy rovnice ve vakuu

$$\rho = 0$$

$$\nabla \vec{E} = 0$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \vec{B} = 0$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Žádné statické ani pohybující se náboje

$$\vec{j} = \vec{0}$$

Využití operátorové identity

$$\vec{X} = \vec{E}, \vec{B}$$

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{X}) = \nabla (\nabla \cdot \vec{X}) - (\nabla \cdot \nabla) \vec{X}$$

$$\nabla \cdot \nabla = \Delta$$

Vlnové rovnice elmg.pole ve vakuu

$$\Delta \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

$$\Delta \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}$$

Konstanta c ve vlnové rovnici má význam rychlosti šíření vlnění

Vlnové rovnice pro potenciály

$$\Delta \varphi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}$$

$$\Delta \vec{A} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2}$$

Skalární elektrický potenciál

$$\vec{E} = -\nabla \varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

Vektorový potenciál

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Lorenzova kalibrační podmínka

$$\nabla \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$$

Potenciály nejsou určeny silovým polem jednoznačně, Lorenzova kalibrační podmínka zjednodušuje tvar rovnic, případně lze zvolit skalární potenciál roven nule a popsat vlnění jen vektorovým potenciálem

Základy kvantové teorie

Úkoly:

- ◆ Připomeňte si pojem **exponenciální funkce** a její graf.
- ◆ Vysvětlete pojmy **komplexní číslo, imaginární jednotka, algebraický a goniometrický zápis komplexního čísla**.
- ◆ Zopakujte si jak jsou definovány **základní operace s těmito čísly** jako je sčítání, odečítání, násobení, dělení ad.
- ◆ Vysvětlete pojmy **vlnění, vlna a vlnová rovnice**.
- ◆ Uveďte příklady pro různé **typy vlnění**.
- ◆ Co se vlní v případě mechanického vlnění či zvuku a co v případě elektromagnetického vlnění?

Základy kvantové teorie

◆ Rovinná elmg. vlna – řešení Maxwellových rovnic ve vakuu

Matematická forma rovnic, je totožná pro elektrickou intenzitu, magnetickou indukci i vektorový potenciál (3+3= 6 složek), z kterého lze obě předchozí veličiny určit, pro popis tedy stačí vektorový potenciál (3 složky)

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

Eulerovo číslo

Imaginární jednotka

Fázová rychlost šíření elmg. vlny
 $c = \omega / k = v \cdot \lambda$

Polohový vektor

Čas

Amplituda

Uhlová frekvence (rovna $2\pi\nu$) kmitů v daném místě (ν – frekvence = kmitočet)

Vlnový vektor (velikost $2\pi/\lambda$) ve směru šíření vlnění (λ – vlnová délka, $1/\lambda$ – vlnočet)

Komplexní exponenciála

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$$

Základy kvantové teorie

kvantová povaha elmg. záření – foton

Pro objev této povahy byla významná zejména tato experimentální východiska

- ◆ **záření absolutně černého tělesa** – odvození **Planckova zákona** na základě představy o kvantování energie elmg. záření – **Planckův vztah**;
- ◆ **Lenardův pokus** zkoumající zákonitosti fotoelektrického jevu a **Einsteinovo objasnění** výsledků tohoto experimentu na základě představy o korpuskulární povaze elmg. záření - **fotony**;
- ◆ **Comptonův jev** a odvození **Comptonova vztahu** na základě představy srážky fotonu s volným elektronem;

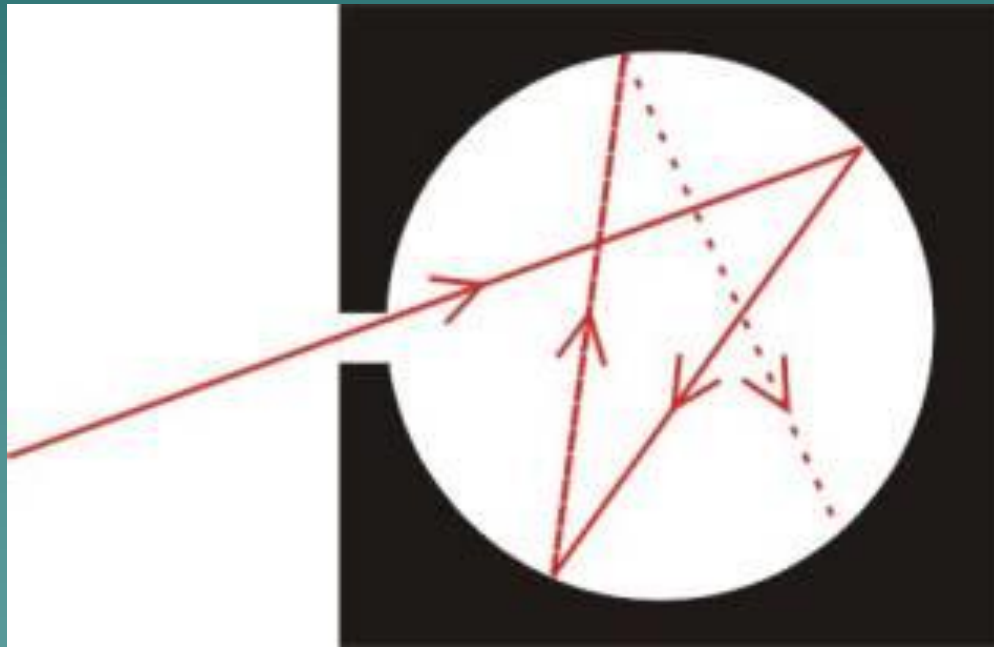
Základy kvantové teorie

Záření absolutně černého tělesa

- ◆ Dopadá-li na reálné těleso (někdy též „šedé“ těleso) emg. záření, pak část záření se pohltí (**absorpce**) a část se odrazí (**reflexe**) či prochází (**transmise**).
- ◆ Pro zjednodušení problému se vytváří představa **absolutně černého tělesa** (někdy označované pouze jako **černé těleso**).
- ◆ **Absolutně černé těleso** pohlcuje veškeré dopadající záření.

Základy kvantové teorie

*Jedna z realizací „téměř
absolutně“ černého tělesa*



Základy kvantové teorie

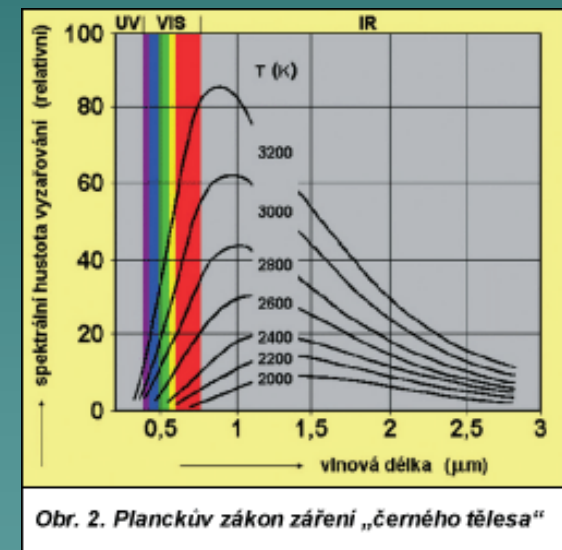
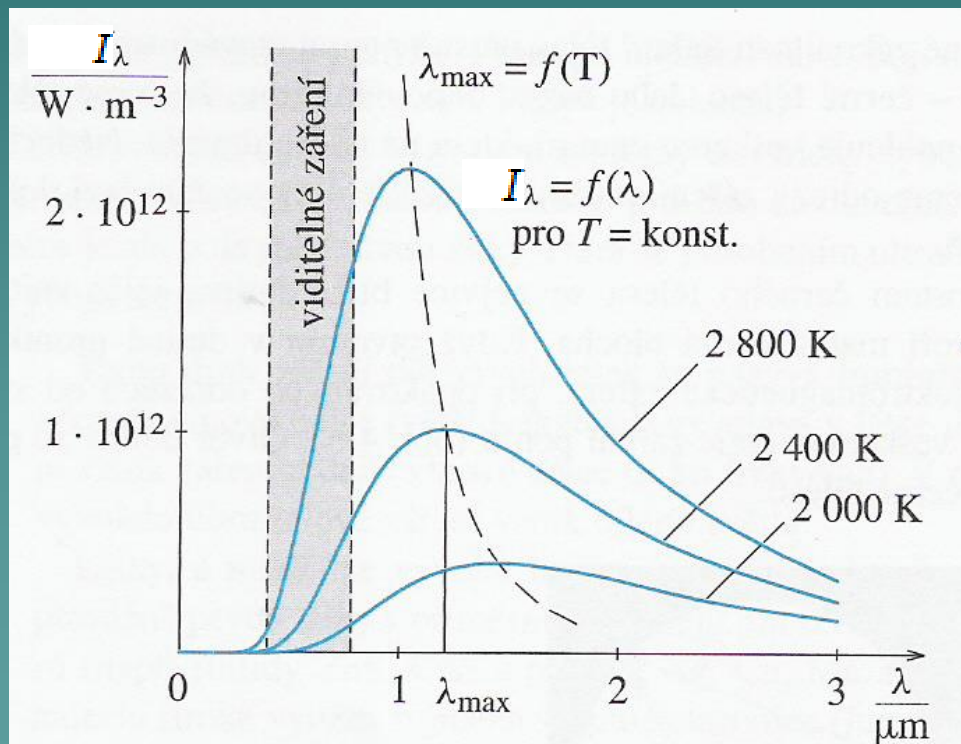
- ◆ Při pohlcení záření se černé těleso zahřívá
- ◆ Pokud naopak ohřejeme absolutně černé těleso na určitou teplotu, začne vyzařovat na všech vlnových délkách (jde o tzv. **ideální zářič** – ze všech těles o dané teplotě vyzáří nejvíce energie).
- ◆ Intenzita I emitovaného záření ovšem závisí na vlnové délce.
- ◆ Tuto závislost označujeme jako **spektrum** resp. **vyzařovací zákon**.

Základy kvantové teorie

Záření černého tělesa

Spektrální intenzita záření

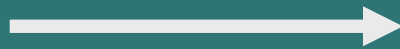
- experimentálně zjištěné spektrum ($I_\lambda(\lambda) = dI(\lambda)/d\lambda$)



I_λ u emitovaného záření se značí M_λ

Základy kvantové teorie

- ◆ Byl odvozen obecný tvar spektra.



$$I_{\lambda} = \frac{1}{\lambda^5} \varphi(\lambda T)$$

- ◆ **Wienův zákon** pro malé λT



$$\varphi(\lambda T) = c_1 e^{-c_2 / \lambda T}$$

- ◆ **Rayleighův-Jeansův zákon** pro velké λT



$$\varphi(\lambda T) = c_3 \lambda T$$

Z klasické statistické termodynamiky

- ◆ Co tedy platí obecně, co platí střední λT ?

Základy kvantové teorie

Planckův zákon

- ◆ Planck navrhnul svou vlastní formuli, která správně popisovala vyzařování absolutně černého tělesa v celém rozsahu vlnových délek.

$$\varphi(\lambda T) = \frac{c_1}{e^{c_2/\lambda T} - 1}$$

- ◆ Pro malé λT dostaneme Wienův zákon
- ◆ Pro velké λT dostaneme R-J zákon
- ◆ Tento vztah lze odvodit až na základě **Planckovy kvantové hypotézy**

Základy kvantové teorie

Planckova kvantová hypotéza

- ◆ Energie elmg. záření se může měnit pouze po částech, tzv. *kvantech*, která mají hodnotu

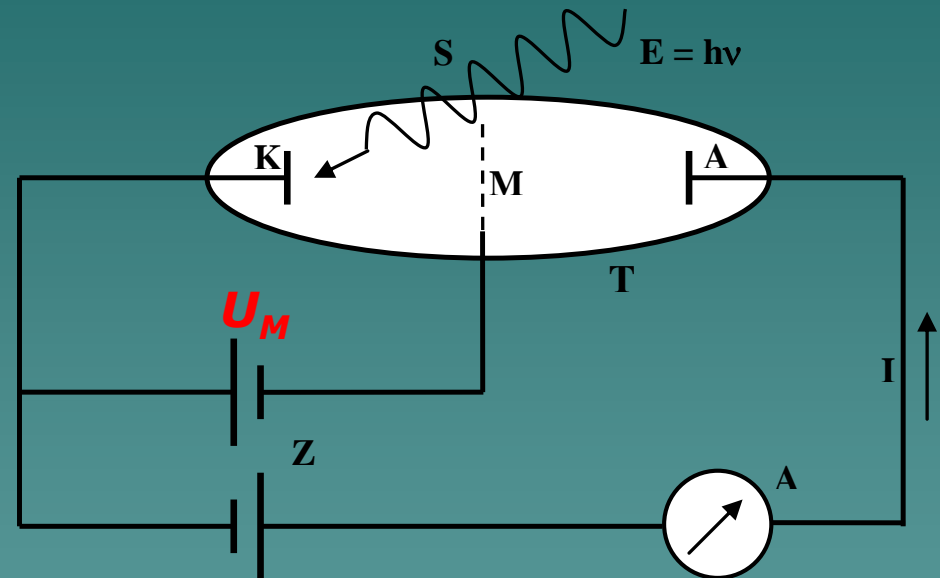
$$E = h\nu = \hbar\omega$$

- ◆ Konstanta h je tzv. **Planckova konstanta** a ν je frekvence elmg. záření.

Základy kvantové teorie

Fotoefekt – Lenardův pokus

- ◆ Elektromagnetické záření (světlo) dopadající na látku může způsobit **emisi elektronu z látky**
- ◆ Ve vyčerpané trubici byla umístěna katoda a anoda pod elektrickým napětím.
- ◆ Katoda byla osvětlována monochromatickým zdrojem (jediná vlnová délka) světla.
- ◆ Pokud byly po dopadu světla emitovány elektrony – nositelé náboje, protékal celým obvodem elektrický proud – tzv. **fotoproud**.



Lenardův experiment

T - vyčerpaná trubice, S – monochromatické elektromagnetické záření, K – katoda, A – anoda, M – mřížka, Z – zdroje napětí, A – ampérmetr k detekci procházejícího fotoproudu I.

Základy kvantové teorie

Lenardův experiment

Očekávání dle klasické vlnové teorie:

Zvýšení intenzity světla
zvýší kinetickou energii elektronů.

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$$

Intenzita světla se může definovat jako
střední časová hodnota
Poyntingova vektoru
(plošná hustota toku energie ve W/m²)

Výsledky experimentu

- ◆ Kinetická energie elektronů se nezvětšuje s intenzitou světla.
- ◆ S intenzitou světla roste naopak fotoproud, tedy počet vyražených elektronů.
- ◆ Fotoproud se objeví až při určité **mezní frekvenci**

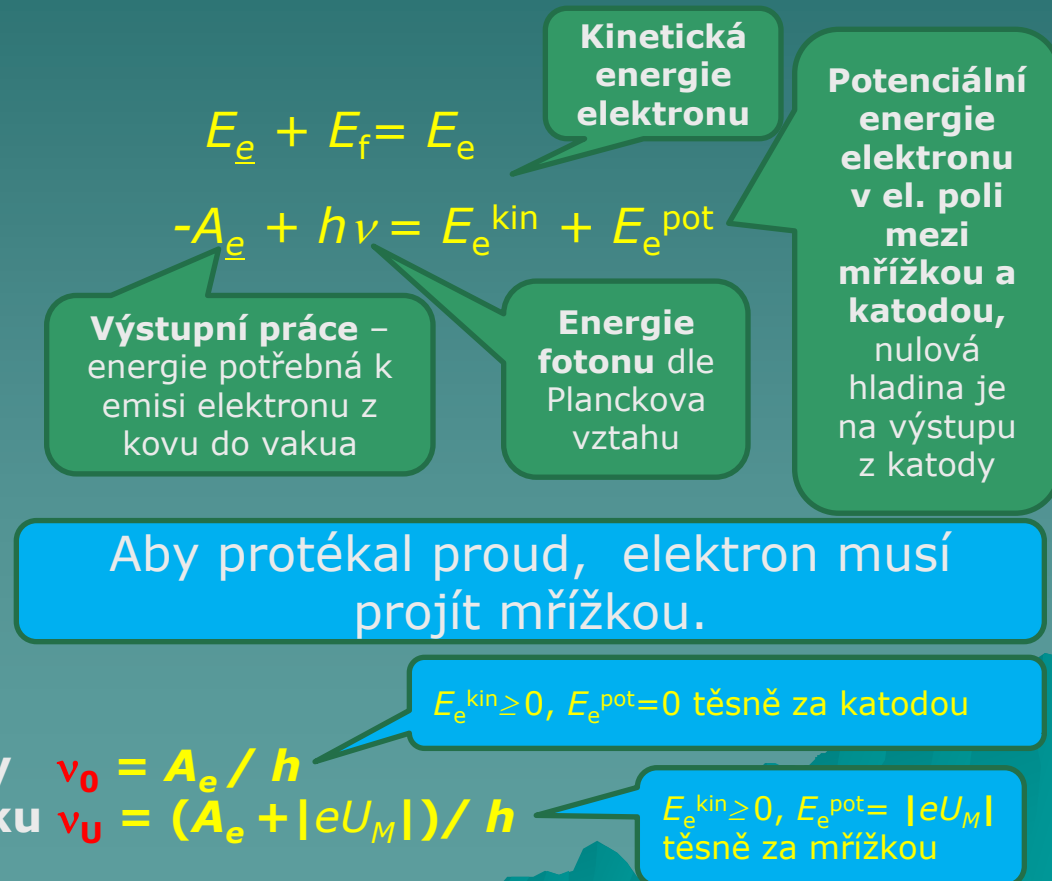
Základy kvantové teorie

Einsteinovo objasnění Lenardova experimentu

- Fotony

- ◆ Vysvětlení výsledků Lenardova experimentu podal Einstein předpokladem, že elektrony při fotoefektu jsou z látek vyraženy částicemi elektromagnetického záření.
- ◆ Tyto částice mají energii úměrnou frekvenci podle stejného vztahu, který předpokládal Planck (**Planckův vztah**). Tyto částice byly později pojmenovány **fotony** (Gilbert N. Lewis).

Zákon zachování celkové energie (absorbce fotonu)



Mezní frekvence pro emisi z katody $\nu_0 = A_e / h$

Mezní frekvence pro emisi za mřížku $\nu_U = (A_e + |eU_M|) / h$

Základy kvantové teorie

Comptonův – jev

- ♦ V roce 1922 provedl americký fyzik Arthur Holly COMPTON experiment s **rozptylem rentgenového záření na volných elektronech**.
- ♦ V těchto experimentech dopadalo rentgenové záření (o vlnové délce $\lambda = 0,07 \text{ nm} - \text{Mo}$) na **uhlíkový terčik**.
- ♦ Záření se **rozptylovalo do různých směrů**, které svírají s původním směrem úhel ϑ (**úhel rozptylu**).
- ♦ Záření procházející v **původním směru ($\vartheta=0$)** mělo **původní vlnovou délku λ**
- ♦ **Záření rozptýlené do jiných úhlů ($0 < \vartheta < \pi$)** mělo **vlnovou délku $\lambda' > \lambda$**
(maximální rozdíl $\lambda' - \lambda$ pro $\vartheta = \pi/2$)

ROZPOR S PŘEDSTAVOU KLASICKÉ FYZIKY

Podle představ klasické fyziky dopadající záření rozkmitá elektrony v atomech. Elektrony by měly kmitat s frekvencí ν a vyzařovat elektromagnetické záření o stejné frekvenci ν . **Rozptýlené záření by tedy mělo obsahovat pouze jednu vlnovou délku ($\lambda = c / \nu$).**

Volné elektrony, v realitě jde o tzv. slabě vázané elektrony, po srážce s fotonem téměř volně pohybovat v látce, pro emisi elektronu z látky je stále třeba dodat výstupní práci.

Příklad pro $\vartheta = \pi/2$ (Compton 1923) - spektrum záření po rozptyle (plná čára) je podobné, ale posunuté oproti původnímu (čárkovaně) k delším vlnovým délkám

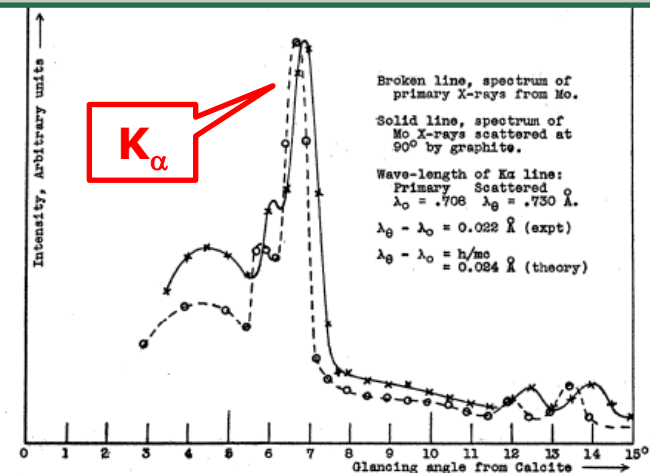


Fig. 4. Spectrum of molybdenum X-rays scattered by graphite, compared with the spectrum of the primary X-rays, showing an increase in wave-length on scattering.

Vlnová délka roste
(s rostoucím úhlem odrazu
na Braggově spektrometru)

Základy kvantové teorie

Comptonovo objasnění experimentu

- ◆ Výsledky experimentu objasnil Compton jako **důsledek pružných srážek fotonů s elektrony**.
- ◆ Compton ovšem zavedl kromě energie fotonu dané *Planckovým vztahem*, též **hybnost fotonu**.

Planckova konstanta

$$\vec{p}^f = \frac{\hbar\omega_0}{c} \vec{n}$$

Úhlová frekvence elmg. záření

Jednotkový vektor ve směru šíření elmg. záření

Rychlost elmg. záření - konstanta

Hypotéza - rychlost fotonu $v^f = c$, pak velikost hybnosti $p^f = mc = mc^2/c = E^f/c = h\nu/c = h/\lambda$

Základy kvantové teorie

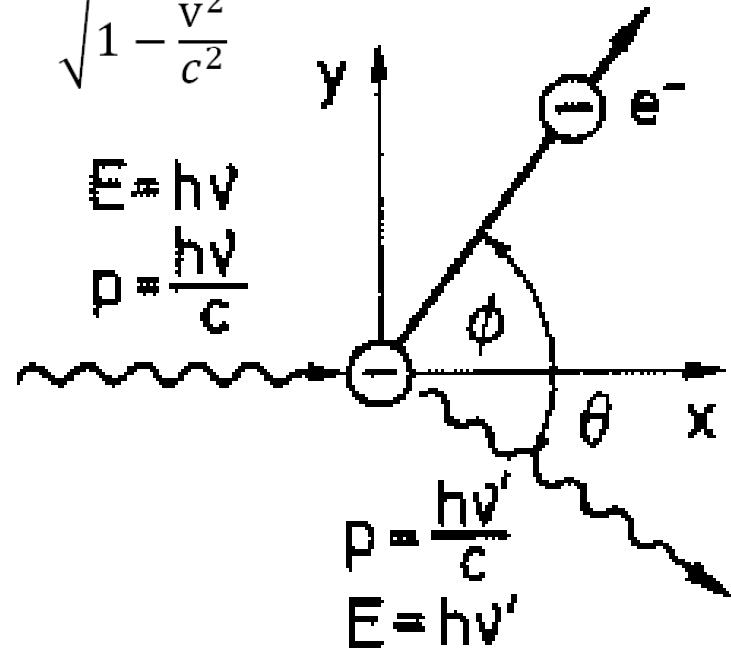
Comptonův – jev

- ◆ Rozptyl krátkovlnného (rentgenového záření) v látkách.
- ◆ Vlnová délka rozptýleného záření byla funkcí rozptylového úhlu.

Hmotnost relativistického elektronu se mění s rychlostí

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$E = mc^2, p = mv$$



Základy kvantové teorie

Comptonův jev - princip odvození spektrálního posunu

Z.Z. energie

$$E_f + E_e = E_f' + E_e'$$

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + mc^2$$

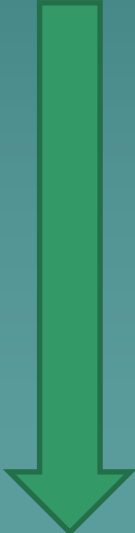
Z.Z. hybnosti

$$\vec{p}_f + \vec{p}_e = \vec{p}_f' + \vec{p}_e'$$

$$h\nu\vec{n}_0 + 0 = h\nu'\vec{n}'_0 + m\vec{v}c$$

Vynásobit rychlostí světla c.

Obě rovnice pak mají před úpravou stejný rozměr (tj. energie)

- 
- U obou rovnic ponechat vpravo jen 2. členy, 1. členy převést doleva.
 - Umocnit obě rovnice na druhou, u 2. rovnice má mocnění jednotkového vektoru význam jeho skalárního součinu sama se sebou, skalární součin jednotkových vektorů v původním směru a směru rozptylu je $\cos(\vartheta)$.
 - Odečíst od 1. rovnice 2. rovnici.
 - Dosadit vpravo za m dle relativistického vztahu pro hmotnost a upravit (závislost na rychlosti v zmizí).
 - Po vyrušení některých členů vlevo a vyřešit pro $v' = \mathbf{f}c(\cos(\vartheta), v)$.
 - S využitím vztahu $v\lambda = c$, vyjádřit $\Delta\lambda = (\lambda' - \lambda) = \mathbf{konst} * (1 - \cos(\vartheta))$.

Základy kvantové teorie

Comptonův vztah

- ◆ Pro spektrální posun vlnových délek v lze odvodit vztah:

$$\Delta\lambda = \Lambda \cdot 2 \sin^2(\vartheta / 2)$$

Pro uhel $\vartheta = \pi/2$ (záření rozptýlené do směru kolmého ke směru dopadajícího záření) je rozdíl vlnových délek přesně roven Comptonově vlnové délce (viz původní Comptonův graf)

Úprava goniometrickým vzorcem

$$\left| \sin \frac{x}{2} \right| = \sqrt{\frac{1 - \cos x}{2}}$$

- ◆ **Comptonova vlnová délka elektronu**

Tuto charakteristiku můžeme zavést i pro jiné částice s jinou hmotností m

$$\Lambda = \frac{h}{m_0^e c} = 0,024265 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Hmotnost volného elektronu, vztah s dobrou přesností platí i pro **slabě vázaný elektron**.
Pozorujeme spektrální posun.

Pro silně vázaný elektron se tato hmotnost musí nahradit hmotností atomu či celé mřížky.
Spektrální posun je pak prakticky nulový.



Kromě čáry pocházející z rozptylu na slabě vázaných elektronech tak pozorujeme i původní čáru, která pochází z rozptylu na pevně vázaných vnitřních elektronech

Základy kvantové teorie

(korpuskulárně vlnový dualismus elmg. záření)

- ♦ V závislosti na podmínkách experimentu se elmg. záření chová jako
 - proud fotonů (částic resp. „korpuskulí“) nebo
 - vlnění elektromagnetického pole šířící se prostorem

Jednoduché lineární vztahy

Vztahy mezi částicovým a vlnovými charakteristikami

Energie fotonu

$$E = \hbar \omega$$

Úhlová frekvence vlnění

$$E = h\nu$$

Frekvence resp. kmitočet vlnění

Hybnost fotonu

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Vlnový vektor

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}_0$$

$$\vec{p} = h \left(\frac{1}{\lambda} \right) \vec{n}_0 = h\bar{\nu} \vec{n}_0$$

Jednotkový vektor ve směru šíření vlny

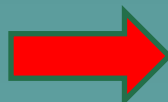
Vlnová délka

Vlnočet

Speciálně pro elmg. vlnu platí

$$\nu = c \left(\frac{1}{\lambda} \right)$$

$$\omega = c |\vec{k}|$$



$$\vec{p} = h \left(\frac{\nu}{c} \right) \vec{n}_0 = \hbar \left(\frac{\omega}{c} \right) \vec{n}_0$$

Základy kvantové teorie

De Broglieho vlnová hypotéza

- ◆ Vychází z **korpuskulárně vlnového dualismu v případě elmg.vln – fotonů.**
- ◆ Fotony jsou částice, které lze popsat elmg. vlnou.
- ◆ De Broglie **zobecnil tento dualismus na všechny částice.**

Základy kvantové teorie

Fotonová hypotéza

◆ FOTON $E = \hbar\omega$ $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

◆ ELMG. VLNA $\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

Základy kvantové teorie

De Broglieho vlnová hypotéza

Volně se pohybující částice s energií E a hybností \vec{p} je popsána postupnou rovinnou vlnou ve tvaru

De Broglieho vlna

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}$$

De Broglieho vztahy

$$\omega = E / \hbar, \quad \vec{k} = \vec{p} / \hbar$$

Základy kvantové teorie

Davissonův-Germerův pokus

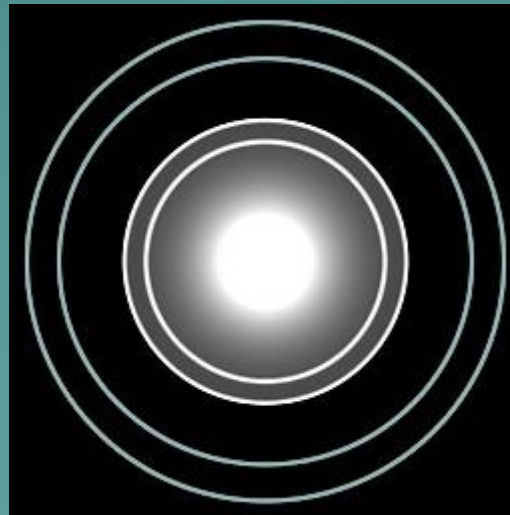
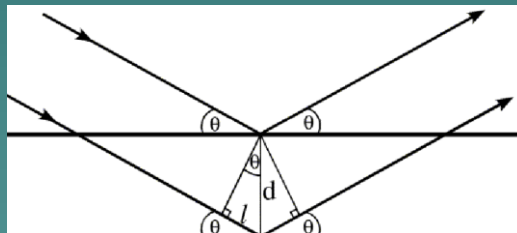
Ověřuje de Broglieho hypotézu.

- ♦ V experimentu se pozoroval **rozptyl elektronů na krystalové mřížce**.
- ♦ **De Broglieho vlnová délka** elektronů odpovídala řádově **vzdálenostem mezi atomovými rovinami v krystalu**.
- ♦ Při experimentu byly pozorovány obdobné **difrakční obrazce** jako v případě rozptylu rentgenového záření (fotony) se stejnou vlnovou délkou. Potvrzují **vlnový charakter částic**.

Braggova difrakční podmínka

- dráhový rozdíl po odrazu vlnění ze sousedních rovin vzdálených d pod úhlem θ je roven celistvému násobku vlnové délky λ

Interferenční maxima pro $2d \sin \theta = n \cdot \lambda$



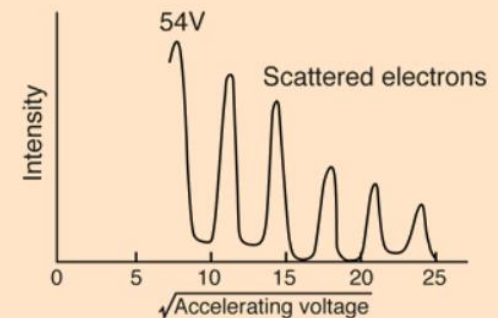
De Broglieho vztah pro vlnovou délku elektronu $p = h/\lambda$

- velikost vlnové délky se řídí hybností a tedy kinetickou energií E elektronů a ta urychlujícím napětím U

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{n}{2d \sin \theta} = \frac{p}{h} = \frac{\sqrt{2mE}}{h} = \frac{\sqrt{2meU}}{h}$$

$$E = p^2/2m$$

$$\begin{aligned} ZZE \\ E \equiv E_k = |e \cdot U| \end{aligned}$$

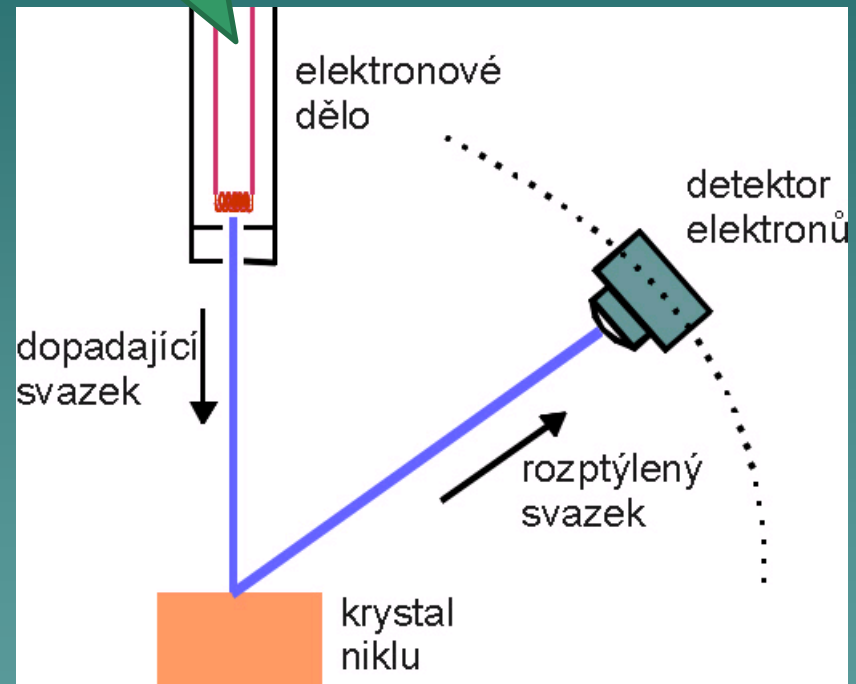


Základy kvantové teorie

Uspořádání experimentu

- ◆ *Svazek elektronů dopadá na krystal niklu.*
- ◆ *Intenzita rozptýlených (odražených) elektronů v závislosti na směru se měří pohyblivým detektorem elektronů.*
- ◆ *Měří se proud, jenž vytváří elektrony dopadající do detektoru (Faradayův detektor – ang. Faraday cup).*

Urychluje se rozdílem, resp. spádem elektrických potenciálů, tedy napětím



Základy kvantové teorie

disperzní vztah pro de Broglieho vlny

Disperzní vztah

Tento termín původně označuje v teorii vlnění závislost fázové rychlosti vlny V , či v případě světla též indexu lomu $n=c/V$, na vlnové délce záření. Tedy závislost

$$V = V(\lambda).$$

Vzhledem k platnosti definičních vztahů $k = 2\pi / \lambda$ a $V = \omega / k$ se však označují jako *disperzní vztah* též závislost $V = V(k)$, či závislost V na jiné veličině jednoznačně spojené s vlnovou délkou, nebo závislost

$$\omega = \omega(k).$$

$$E = h \nu$$
$$p = h / \lambda$$

Energie volné relativistické částice

Vztahy platí pro všechny volné částice

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

Za E a p dosadíme z de Broglieho vztahů

$$\nu = h^{-1} \sqrt{h^2 c^2 / \lambda^2 + m_0^2 c^4}$$

Vztahy platí jen pro FOTON !!!

$$E = c \cdot p$$

Foton

$$\nu = c \left(\frac{1}{\lambda} \right)$$

Klidová hmotnost fotonu je tedy nulová

Základy kvantové teorie

fázová a grupová rychlost

Fázová rychlost a grupová rychlost de Broglieho vlny

S využitím relativistických vztahů pro energii a hybnost můžeme spočítat fázovou rychlost V a grupovou rychlost v_g de Broglieho vlny.

Fázová rychlost určuje pohyb monochromatické vlny s danou vlnovou délkou a platí pro ni

$$V = \frac{\omega}{k} = \frac{E/\hbar}{p/\hbar} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}$$

Grupová rychlost určuje rychlost pohybu vlnového balíku, vzniklého skládáním monochromatických vln, a platí pro ni

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(E/\hbar)}{dp} \frac{dp}{dk} = \frac{\hbar dE}{\hbar dp} = \frac{dE}{dp} = \frac{1}{2} \frac{2pc^2}{E} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{p}{m} = v$$

Fázová rychlost se obecně liší od rychlosti pohybu částice

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

Grupová rychlost je rovna rychlosti pohybu částic

$$E = mc^2$$

Souvislost **rychlosti částice** a **fázové rychlosti** sdružené de Broglieho vlny

$$V \cdot v = c^2$$

$$v \leq c$$



$$V \geq c$$

Monochromatická de Broglieho vlna se šíří **nadsvětelnou rychlostí**, pouze **fotony** a **elmg vlny** se šíří **stejnou rychlostí c**.

Základy kvantové teorie

Schrödingerova rovnice pro **volnou částici**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

- ◆ Jejím řešením je **de Broglieho vlna**
- ◆ Ověří se dosazením
- ◆ Musí platit **$E=p^2/2m$**
- ◆ **SR** lze chápat jako **operátorovou analogii** vztahu energie hybnost (operátory ale v rovnici působí na vlnovou fci).

Vztah energie a hybnost
v klasické (nerelativistické) fyzice
(u volné částice je celková energie E
rovna kinetické energii)

Princip korespondence mezi klasickou (tj. zde nekvantovou) teorií a kvantovou teorií:
klasickým fyzikálním veličinám v kvantové teorii odpovídají (přiřazujeme) operátory.

Základy kvantové teorie

Operátory a princip korespondence.

- ◆ **Vlnová funkce** je (v základním tvaru) funkcí souřadnic všech částic v systému, případně též času, a popisuje stav systému v kvantové fyzice (též. kvantový stav), případně i jeho časový vývoj.

Např. pro jednu částici $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(x, y, z, t)$

- ◆ **Operátor** (např. \hat{A}) chápeme jako matematický objekt, který zleva působí na vlnovou funkci Ψ . Výsledkem tohoto působení je obecně jiná vlnová funkce Φ .

$$\hat{A} \Psi = \Phi$$

- ◆ Operátory jsou nejčastěji vyjádřeny pomocí **funkcí souřadnic** ($\hat{A} \equiv A(x, y, z)$), výsledkem operace $\hat{A} \Psi$ je násobení funkcí, tj. $\Phi(x, y, z) = A(x, y, z) \cdot \Psi(x, y, z)$
- ◆ a **parciálních derivací** podle těchto souřadnic.

Např. $\hat{A} \equiv \cos(x) + \sin(y)$, nebo $\hat{B} \equiv \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}$

Základy kvantové teorie

(některé operátory)

Jen pro volné
částice $E = E_k$

„operátor“
celkové
energie E

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Výsledek
působení na
de Broglieho
vlnu

Násobení E

operátor
kinetické
energie E_k

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

Násobení
 $E_k = p^2/2m$

Zavedení
operátoru
hybnosti

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

Vyjádření
operátoru
kinetické
energie

$$\hat{E}_k = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Operátory přidružené fyzikálním veličinám
značíme pro odlišení **stříškou** (často se
vynechává stejně jako u značení vektorů šipka)

Operátorová
analogie vztahu
 $E_k = p^2/2m$

Základy kvantové teorie

- ◆ **Vlnové rovnice kvantové mechaniky** lze formálně získat pomocí principu korespondence – ve vztazích (celková) **energie – hybnost** pro daný systém nahradíme hybnost a energii příslušnými operátory.

Úkol: Sestavte příslušné vlnové rovnice

Klasické (nekvantové) vztahy energie hybnost

- ◆ Nerelativistická volná částice $E = E_k$
 $E = p^2/2m$
- ◆ Nerelativistická vázaná částice (v potenciálu U) $E = E_k + E_p$
 $E = p^2/2m + U$
- ◆ Relativistická volná částice $E = E_0 + E_k$
 $E^2 - p^2c^2 = m_0^2c^4$

Relativistická vlnová rovnice odvozená pro poslední případ se dnes nazývá Kleinova-Gordonova.

Tu ale nelze použít na elektrony, popisuje částice s nulovým spinem.

Základy kvantové teorie

Schrödingerova rovnice

pro vázanou částici (tj. v potenciálu U)

Volná částice
(celková energie)
 $E = E_k$

Vázaná částice
(celková energie)
 $E = E_k + U$

$$\hat{E}_k$$

$$\hat{E}_k$$

Formální
substituce
operátorů

Derivace dle souřadnic
+ násobení konstantou

Násobení funkcí (mech. potenciálem U)

$$\left[-\hbar^2 \frac{\Delta}{2m} + U(\vec{r}) \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

Derivace dle času
+ násobení konstantou

- ♦ jejím řešením již není de Broglieho vlna, ale **obecná vlnová funkce Ψ**
- ♦ Obě rovnice jsou tzv. **časové SR** neboli **nestacionární SR**.

Základy kvantové teorie

Vlnová funkce Ψ (pro jednu částici)

$$\Psi(\vec{r}, t)$$

- ♦ je funkcí polohy částice \vec{r} a času t

- ♦ její konkrétní tvar získáme řešením výše uvedených časových SR (pro tuto jednu částici – volnou či vázanou)

Popis pomocí SR a vlnové funkce lze však zobecnit i pro systém více částic (popsáno později)

- ♦ v případě, že se zachovává energie, lze její řešení hledat ve tvaru

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \cdot \Psi(t)$$

- ♦ Po dosazení tohoto řešení do časové (nestacionární) SR lze provést tzv. **separaci proměnných a SR rovnice se rozpadne na dvě nezávislé rovnice:**

- časovou část s triviálním řešením analogickým tomu v de Broglieho vlně
- bezčasovou (stacionární) SR

Původní představa o vlnách hustoty hmotnosti se nepotvrdila

- ♦ **Vlnové funkci je potřeba přiřadit fyzikální význam (měřitelnou fyzikální veličinu).**

Základy kvantové teorie

(pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce)

Fyzikální význam vlnové funkce
(jedné částice)

Bornův postulát

Druhá mocnina
modulu
vlnové funkce

V kvantové fyzice
označujeme
komplexně
sdruženou funkci
hvězdičkou

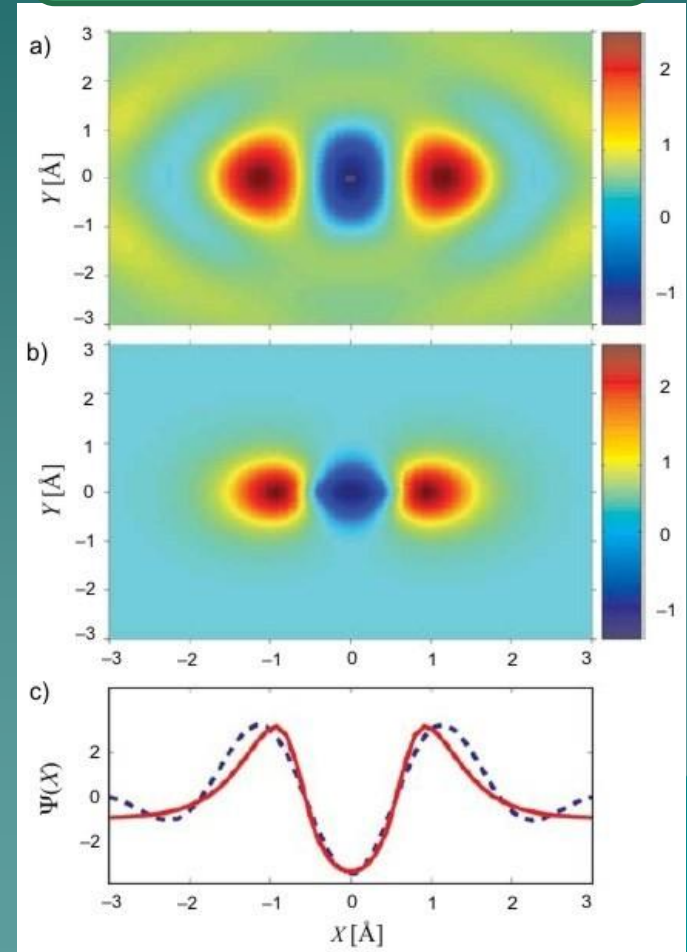
$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t)\Psi^*(\vec{r}, t)$$

má význam hustoty
pravděpodobnosti nalezení
částice v místě \vec{r}

a v čase t

Pozn: u N částic půjde
nalezení jednotlivých částic
v místech $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N$
a v čase t

Příklad znázornění
vlnové funkce



Bohrnův postulát - komentáře

- **Bornův postulát** je možno analogicky formulovat i **pro vícečásticový systém**. Kvadrát modulu vlnové funkce závislé na souřadnicích všech částic pak představuje hustotu pravděpodobnosti nalezení částic v příslušných polohách (určených souřadnicemi částic).
- **Pravděpodobnost nalezení částice** v určitém vymezeném objemu V prostoru je dána integrálem: $P_V = \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}$.
- Pokud Ψ je řešením SR, můžeme se přesvědčit, že také $\text{konst} \cdot \Psi$ je řešením SR. Aby se zajistila jednoznačnost řešení SR, klade se na vlnovou funkci Ψ tzv. **normovací podmínka** (viz dále).
- Protože bývá zvykem volit pravděpodobnost, která odpovídá absolutní jistotě, rovnu 1, je vhodné **normovat vlnovou funkci**, tzn. vynásobit vlnovou funkci číselným faktorem (normovací faktor) takovým, že pravděpodobnost nalezení částice, kdekoli v prostoru je rovna 1. Normovaná vlnová funkce tedy musí vyhovovat **normovací podmínce**,

kteřá má v kartézských souřadnicích tvar:
$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1.$$

Normovat lze ale pouze v případě, že integrál na levé straně nediverguje. Nelze například normovat de Broglieho vlnu.

Vícečásticový systém

Vlnová funkce pro N - částic

Polohový vektor i-té částice

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t) \quad \vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i), i = 1, 2, 3 \dots N$$

čas

Index i , na jeho označení nezáleží

Bornův postulát (N částic)

Druhá mocnina modulu vlnové funkce pro N částic, tj.

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t) \cdot \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t)$$

má význam hustoty pravděpodobnosti nalezení jednotlivých částic v místech $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N$ a v čase t

tzv. konfigurace
(myšleno částic v prostoru).

Vícečásticový systém

obecná vlnová funkce a obecná SR

Vlnová funkce pro N - částic

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t)$$

čas

Polohový vektor i-té částice

$$\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i), i = 1, 2, 3 \dots N$$

Index i , na jeho označení nezáleží

Obecný tvar časové (nestacionární) SR pro N-částic

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t)$$

Diferenciální rovnice pro určení neznámé funkce Ψ

Imaginární jednotka i - „odmocnina z -1“ viz komplexní čísla
Neplést s indexem i

1. Derivace dle času – pro řešení je třeba znát funkci v počátečním čase t_0
- srovnej např. Newtonovy pohybové rovnice (2. derivace)

Hamiltonián – operátor působící na funkci Ψ sestavíme dle principu korespondence, veličiny ve vztahu pro celkovou energii systému jsou nahrazeny jejich operátory

Vícečásticový systém - hamiltonián

Operátor
hybnosti i-
té částice

$$\hat{p}_i = -i\hbar\nabla_i = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial y_i}, \frac{\partial}{\partial z_i}\right), \quad i = 1, 2, 3 \dots N$$

Operátor
kinetické
energie i-té
částice

$$\hat{T}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} = \frac{(-i\hbar\nabla_i)^2}{2m_i} = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i$$

Vztah až na znak operátoru
(stříška) formálně shodný
s tím pro fyzikální veličiny

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_i} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right), \quad i = 1, 2, 3 \dots N$$

Hmotnost i-té částice

Operátor potenciální energie
všech částic, resp. interakční
energie (vzájemného působení)

Hamiltonián
-
operátor
celkové
energie

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$$

Stříšku nemusíme psát – produkt
působení U na funkci Ψ je prostě
násobení obou funkcí U. Ψ

$$= -\hbar^2 \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \Delta_i + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$$

Součet operátorů kinetické energie
(analogie součtu kinetických energií)

Laplaceův operátor obsahuje druhé
derivate – jde o aplikaci operátoru
derivate nikoliv násobení

Separace proměnných v ČSR

Časová (též nestacionární) SR – obsahuje závislost na čase t

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t)$$

Pokud se energie zachovává (konstanta v čase), hamiltonián není funkcí času, lze uvažovat tvar funkce

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, t) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \Psi(t)$$

Nepůsobí na čas

Nepůsobí na souřadnice

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \Psi(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \Psi(t)$$

$$\Psi(t) \hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) \right)$$

Vydělení
 Ψ

Dvě funkce se mají rovnat, každá je ale závislá na jiné nezávislé proměnné (čas a souřadnice) – rovnost je možná jen pokud funkce jsou **konstantní**

$$\frac{\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)}{\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)} = \frac{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t)}{\Psi(t)} = E$$

konstanta

Vztah časové a bezčasové SR

Časová SR se rozpadne na dvě rovnice

1. Bezčasová (též stacionární) SR

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$$

Též charakteristická rovnice (operátoru) hamiltoniánu, hledáme netriviální (nenulové) řešení tj. vlastní čísla E a jim odpovídající vlastní funkce Ψ

Vlastní funkce – vlnová funkce vyhovující rovnici
Význam: určuje např. pravděpodobnosti výskytu částic

Vlastní čísla – vlastní hodnoty celkové energie systému částic – jejich soubor (spektrum energií) určuje dovolené energie (energetické hladiny) systému

Vázané systémy – diskrétní energetické spektrum (lze očíslovat přirozenými čísly)
Volné částice – spojité spektrum energií jako v klasické fyzice

2. Rovnice pro časovou část vlnové funkce

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = E \Psi(t)$$

řešení

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Řešení je jednoduché, ve formě časové části de Broglieho vlny.

Hustota pravděpodobnosti nalezení částic se nebude měnit s časem

$$\Psi(t)\Psi(t)^* = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{+\frac{i}{\hbar}Et} = 1$$

Řešení SR – postup, výsledky a jejich fyzikální význam

- Máme systém N – částic, známe jejich hmotnosti a konkrétní popis interakce mezi nimi

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$$

- Dříve uvedeným postupem (princip korespondence) sestavíme operátor zvaný hamiltonián a s jeho pomocí časovou SR, v níž neznámou je vlnová funkce.

$$\hat{H}$$

Hamiltonián = operátor celkové energie (ve formě působící na souřadnice)
Analogie Hamiltoniánu v klasické (nekvantové teoretické fyzice)
= celková energie jako funkce souřadnic a hybností částice

- Pokud systém zachovává energii, stačí nalézt tzv. **stacionární řešení bezčasové SR**

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Neznámá vlnová fce Ψ
(hledáme všechny možné hodnoty s netriviálním (nenulovým) řešením)

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$$

Neznámá konstanta E (parametr se určí z podmínky řešitelnosti BSR
- hledáme všechny možné hodnoty s netriviálním (nenulovým) řešením)

Netriviální řešení Ψ lze nalézt jen pro určité tzv. **dovolené hodnoty E**

Jejich soubor = **energetické spektrum systému**

Celková energie systému

Každé dovolené E hodnotě odpovídá konkrétní tvar Ψ

Základy kvantové teorie

Heisenbergovy relace neurčitosti (výchozí poznámky)

- ◆ V klasické fyzice je v principu možné naměřit libovolné dvě veličiny charakterizující systém s libovolnou přesností.
- ◆ V praxi je samozřejmě tato možnost omezena přesností měřících přístrojů a tím, že nejsme ve skutečnosti schopni zahrnout velké množství malých vlivů, které ovlivňují stav systému – tyto vlivy označujeme jako „náhodné“.

Základy kvantové teorie

Heisenbergovy relace neurčitosti

- ◆ **V kvantové fyzice** ovšem dochází k tomu, že **některé dvojice fyzikálních veličin není možné ani teoreticky současně určit absolutně přesně.**
- ◆ Tato **vlastnost** totiž **vyplývá** přímo z teoretického aparátu kvantové fyziky (**z vlastností operátorů fyzikálních veličin**).
- ◆ Je v souladu s **pravděpodobnostní interpretací vlnové funkce** v kvantové mechanice.
- ◆ Přesnost, s níž je možné takové dvojice veličin měřit, je určena vztahy, které se označují jako **relace neurčitosti.**

Základy kvantové teorie

Heisenbergovy relace neurčitosti

Např. Heisenbergova relace neurčitosti pro polohu a hybnost

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar / 2$$

- **Platí analogicky pro zbývající dvojice souřadnic** polohy a hybnosti.
- Jiným příkladem je **libovolná dvojice složek vektoru momentu hybnosti** (v kvantové mechanice není tak tato veličina jednoznačně definována co do směru)
- **Mnoho veličin lze stále měřit současně**, např. libovolnou dvojici souřadnic polohy nebo hybnosti, neodpovídající si dvojice souřadnic polohy a hybnosti (x-y, y-z, z-x), velikost momentu hybnosti a libovolnou jeho složku).