

39-40-41.Kvantový svět

Anotace:

- Subatomární svět se chová odlišně od běžné reality.
 - Kvantová fyzika vysvětluje jevy v subatomárním světě.
 - Příklady otázek, na které kvantová fyzika odpovídá:
 - Periodická tabulka
 - Kvantová mechanika poskytuje rámec pro pochopení atomu a dalších jevů.
 - Základní předpoklad kvantové mechaniky:
 - pohybující se částice (elektrony, protony, atd.) lze nejlépe popsat jako vlny hmoty, jejichž pohyb je dán Schrödingerovou rovnicí. Platí i pro makroskopické objekty (míče, auta, planety), kde klasická Newtonova mechanika stále správně předpovídá chování.
 - pro malé částice je však kvantová mechanika jediný správný rámec pro popis jejich pohybu
 - jednoduché systémy
- Základní informace o atomu.

39

Fotony a de Broglieho vlny



Stopy drobných bublinek v tomto obrázku z bublinkové komory ukazují, kudy se pohybovaly elektrony (stopy vybarveny zeleně) a pozitrony (červené stopy). Jedna γ -částice, která vletěla do komory shora a nezanechala žádnou stopu, vytrhla elektron z jednoho z atomů vodíku, kterými je komora naplněna, a přeměnila se na pár elektron-pozitron. Další γ -částice vytvořila jiný pár o trochu níž. Tyto dráhy (zakřivené magnetickým polem) jasně ukazují, že elektrony a pozitrony jsou částice, které se pohybují podél určitých drah. Přesto tyto částice mohou být také interpretovány jako vlny. Může být částice vlnou?

39.1 NOVÝ SMĚR

Naše diskuse Einsteinovy teorie relativity nás zavedla do světa daleko od obvyklé zkušenosti, do světa objektů pohybujících se rychlostí blízkou rychlosti světla. Einsteinova teorie překvapivě předpovídá, že rychlost chodu hodin záleží na tom, jak rychle se hodiny pohybují vzhledem k pozorovateli: čím rychleji se pohybují, tím pomalejší je jejich chod. Tato i další předpovědi teorie vydržely všechny možné testy, které se dosud podařilo vymyslet, a teorie relativity vedla k hlubšímu a uspokojivějšímu pohledu na podstatu prostoru a času.

Nyní se chystáme prozkoumat jiný svět, který je mimo obvyklou zkušenost — subatomový svět. Setkáme se s celou řadou překvapení, která, i když mohou často vypadat neuvěřitelně, vedla fyziky krok za krokem k hlubšímu pohledu na podstatu světa kolem nás.

Kvantová fyzika, jak se tento nový předmět nazývá, umí odpovědět na otázky jako: Proč svítí hvězdy? Proč jsou prvky seřazeny tak, jak se objevují v periodické tabulce prvků? Jak pracuje tranzistor a jiné mikroelektronické prvky? Proč měď vede elektrický proud a sklo ne? Kvantová fyzika pokrývá celou chemii včetně biochemie. Musíme jí tedy porozumět, pokud chceme pochopit samotný život.

Některé předpovědi kvantové fyziky se zdají podivné i fyzikům a filozofům, kteří studují její základy. Nicméně i tato teorie obstála v každém experimentálním testu — a bylo jich hodně — bez nejmenších problémů. Její předpovědi nikdy neselhal.

39.2 SVĚTELNÉ VLNY A FOTONY

Popsali jsme světlo jako vlnu, která má vlnovou délku λ , frekvenci f a rychlost c spojené vztahem

$$c = \lambda f. \quad (39.1)$$

V kap. 34 jsme na základě Maxwellových rovnic ukázali, že světelná vlna je vzájemně provázaná kombinace elektrického a magnetického pole, z nichž každé se mění s frekvencí f . Dále jsme ukázali, že viditelné světlo je součástí elektromagnetického spektra, které se rozprostírá ve spojitém rozsahu vlnových délek od γ -záření po dlouhé rádiové vlny.

V roce 1905 Einstein navrhl hypotézu, která neplyne z Maxwellových rovnic a přináší první z našich kvantových překvapení: při emisi nebo absorpci světla atomem se nepředává energie spojitě, ale diskrétně, tedy po malých „kouscích“ energie, **kvantech**. Toto kvantum světla nazýváme od roku 1926 **foton**.

Má-li světelná vlna frekvenci f , pak podle Einsteinovy hypotézy je energie E předaná jedním fotonem rovna

$$E = hf \quad (\text{energie fotonu}). \quad (39.2)$$

Zde h je **Planckova konstanta**, která má hodnotu

$$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 4,14 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}. \quad (39.3)$$

Vedle ní (a ještě častěji) se používá tzv. redukovaná Planckova konstanta, která má hodnotu

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}.$$

Planckova konstanta je základní konstanta kvantové fyziky, stejně jako rychlost světla c je základní konstanta relativistické fyziky. Rychlost světla c je velká, ale konečná; kdyby byla nekonečná, nebyla by potřeba teorie relativity. Podobně Planckova konstanta h je malá, ale nenulová; kdyby byla nulová, nebyla by potřeba kvantové teorie.

KONTROLA 1: Seřadte následující záření podle jemu příslušné energie fotonu od nejvyšší po nejnižší: (a) žluté světlo sodíkové výbojky, (b) γ -částice emitovaná radioaktivním jádrem, (c) rádiová vlna vyslaná anténou rozhlasové stanice, (d) mikrovlnný svazek vyslaný radarem pro řízení letového provozu.

PŘÍKLAD 39.1

100 W sodíková výbojka je umístěna ve středu velké koule absorbující veškeré světlo, které na ni dopadá. S jakou četností dopadají fotony na kouli? Vlnová délka sodíkového světla je 590 nm.

ŘEŠENÍ: Z rov. (39.2) je energie fotonu pro sodíkové světlo

$$\begin{aligned} E = hf &= \frac{hc}{\lambda} = \\ &= \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})}{(590 \cdot 10^{-9} \text{ m})} = \\ &= 3,37 \cdot 10^{-19} \text{ J}. \end{aligned}$$

Pokaždé, když atom sodíku vyzáří foton, ztrácí energii $3,37 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, tedy energii 2,1 eV. Kdykoli koule pohlcuje světlo, přebírá energii jen po „kvantech“ této velikosti.

Abychom našli četnost R , s jakou jsou fotony absorbovány na kouli, vydělíme rychlost, s níž výbojka vyzařuje energii (výkon P), hodnotou E :

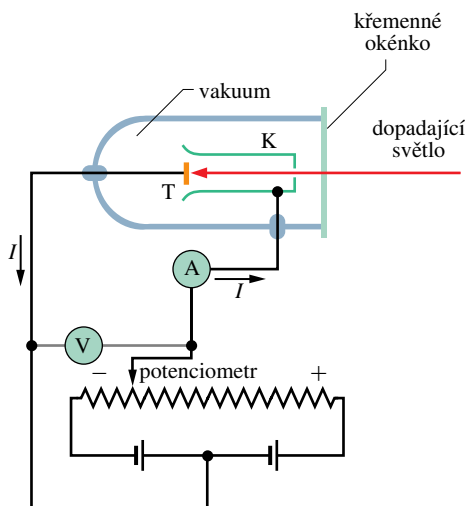
$$\begin{aligned} R = \frac{P}{E} &= \frac{(100 \text{ W})}{(3,37 \cdot 10^{-19} \text{ J/foton})} = \\ &= 2,97 \cdot 10^{20} \text{ fotonů/s}. \quad (\text{Odpověď}) \end{aligned}$$

To je opravdu hodně! Pokud bychom mohli číst slova (jako jakési „fotony“ informace) tímto tempem, pak přečteme všechny knihy v knihovně Kongresu USA asi za nanosekundu.

39.3 FOTOELEKTRICKÝ JEV

Ozařujeme-li svazkem světla s dostatečně krátkou vlnovou délkou čistý kovový povrch, vyraží světlo z tohoto povrchu elektrony. Tento **fotoelektrický jev**, stručně také **fotoefekt**, se využívá v mnoha zařízeních včetně televizních kamer, snímacích elektronek a převaděčů obrazu pro noční vidění — noktovizorů. Einstein použil svou hypotézu fotonu při vysvětlení tohoto jevu, který nemůže být jednoduše pochopen pomocí klasické fyziky.

Rozebereme nyní dva fotoelektrické pokusy, z nichž každý používá zařízení z obr. 39.1. V něm světlo o frekvenci f vyraží při dopadu na terč T elektrony. Napětí U mezi terčem T a kolektorem K volíme tak, aby se tyto elektrony (kterým říkáme **fotoelektrony**) odsály. Takto vytváříme **fotoelektrický proud** I (stručně též **fotoproud**), který měříme ampérmetrem A.



Obr. 39.1 Zařízení pro studium fotoelektrického jevu. Dopadající světlo osvětluje terč T a emituje elektrony, které dopadají na kolektor K. Elektrony se pohybují v obvodu ve směru opačném, než podle konvence ukazují šipky pro proud. Baterií a potenciometrem se nastaví potřebné napětí mezi terčem a kolektorem.

První fotoelektrický pokus

Posuvným kontaktem z obr. 39.1 nastavíme napětí U tak, že kolektor K je záporný vzhledem k terči T. Působením tohoto napětí zpomalujeme vyražené elektrony. Napětí U

pak měníme tak dlouho, dokud nedosáhne hodnoty, které říkáme **brzdné napětí** U_b ; fotoproud I při něm právě klesne na nulu. Pro $U = U_b$ jsou i elektrony emitované s nejvyšší energií zastaveny, a to těsně před dopadem na kolektor. Pak kinetická energie $E_{k,max}$ těchto elektronů s nejvyšší energií je

$$E_{k,max} = eU_b, \quad (39.4)$$

kde e je elementární náboj.

Měření ukazuje, že pro světlo dané frekvence *nezávisí* $E_{k,max}$ *na intenzitě zdroje světla*. Ať je zdroj oslnivě jasný nebo tak slabý, že jej stěží pozorujeme (nebo cokoli mezi tím), nejvyšší kinetická energie emitovaných elektronů má vždy stejnou hodnotu.

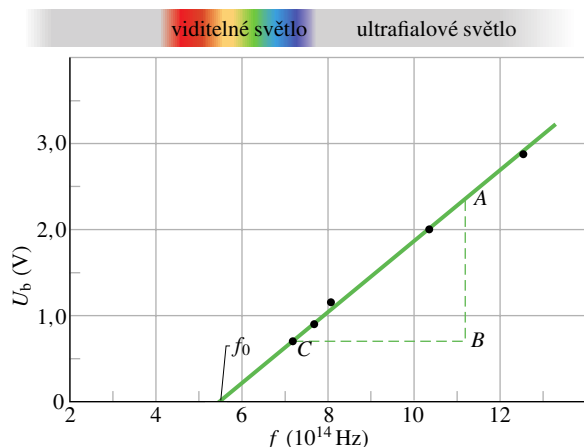
Tento jev *nedokážeme* vysvětlit pomocí klasické fyziky. Považujeme-li dopadající světlo za klasickou elektromagnetickou vlnu, budou elektrony terče kmitat pod vlivem střídavého elektrického pole dopadající světelné vlny. Za jistých podmínek získá kmitající elektron dost energie k tomu, aby unikl z povrchu terče. Když zvýšíme intenzitu dopadajícího svazku světla, zvýšíme tím amplitudu střídavého elektrického pole a zdá se rozumné předpokládat, že toto silnější střídavé pole dodá větší „kopanec“ emitovaným elektronům. To je ale v protikladu s tím, co pozorujeme. Pro danou frekvenci dávají jak intenzivní, tak slabý světelný svazek stejně velký maximální kopanec unikajícím elektronům.

Naproti tomu pozorovaný výsledek přirozeně vyplývá z představy světla jako toku fotonů. Maximální energie, kterou elektron v terči T z obr. 39.1 může získat od dopadajícího světla, je pak energie jednotlivého fotonu. Zvyšováním intenzity světla se zvyšuje *počet* fotonů dopadajících na povrch terče, ale *energie každého fotonu* daná rov. (39.2) zůstává stejná. Maximální kinetická energie dodaná elektronu se tedy nemění.

Druhý fotoelektrický pokus

V tomto pokusu měníme frekvenci f dopadajícího světla a měříme s ním spojený brzdný potenciál U_b . Obr. 39.2 ukazuje závislost U_b na f . Všimněme si, že fotoelektrický jev nenastane, jestliže je frekvence nižší než jistá **prahová frekvence** f_0 ; ukazuje se, že tomu tak je *nezávisle na intenzitě dopadajícího světla*.

To je další záhada pro klasickou fyziku. Pokud světlo považujeme za elektromagnetickou vlnu, musíme předpokládat, že *nezávisle* na tom, jak nízká je její frekvence, mohou být elektrony emitovány *vždy*, pokud jim dodáme dost energie — tedy pokud použijeme dostatečně intenzivní zdroj. *To se ale nestane*. Pro světlo s frekvencí nižší než prahovou fotoelektrický jev nenastane, ať už je světlo jakkoli intenzivní.



Obr. 39.2 Brzdný potenciál U_b jako funkce frekvence f dopadajícího světla pro sodíkový terč T v zařízení z obr. 39.1 (data změřil R. A. Millikan v roce 1916).

Existenci prahové frekvence ale můžeme očekávat, pokud je energie předávána fotony. Elektronů jsou v terči drženy elektrostatickými silami. (Pokud by tomu tak nebylo, vypadávaly by z terče už vlastní vahou.) Aby elektrony právě unikly z terče, musí získat jistou minimální energii Φ , kde Φ je vlastnost materiálu terče, které říkáme **výstupní práce**. Pokud energie hf předaná elektronu přesahuje výstupní práci materiálu (tedy pokud platí $hf > \Phi$), může elektron uniknout z povrchu terče. Pokud předaná energie nepřesahuje výstupní práci (tedy pokud platí $hf < \Phi$), elektrony uniknout nemohou. To je přesně to, co obr. 39.2 ukazuje.

Fotoelektrický zákon

Einstein shrnul výsledky obou fotoelektrických pokusů do jediné rovnice

$$hf = E_{k,\max} + \Phi \quad (\text{fotoelektrický zákon}), \quad (39.5)$$

kteřá vyjadřuje zákon zachování energie pro jednotlivou interakci mezi fotonem o frekvenci f a elektronem z terče o výstupní práci Φ . Zbývající energie ($hf - \Phi$), kterou elektron získá při interakci, se projeví jako jeho kinetická energie. Za nejvýhodnějších podmínek může elektron vystoupit z povrchu bez úbytku této kinetické energie a ocitne se pak mimo terč s maximální možnou energií $E_{k,\max}$.

Přepíšme rov. (39.5) dosazením za $E_{k,\max}$ z rov. (39.4). Po malých úpravách dostaneme

$$U_b = \frac{h}{e} f - \frac{\Phi}{e}. \quad (39.6)$$

Podíly h/e a Φ/e jsou konstantní, a tak očekáváme lineární závislost změřeného brzdného potenciálu U_b na frekvenci f , jak ukazuje obr. 39.2. Dále pak směrnice přímky

by měla být rovna h/e . Pro kontrolu změříme na obr. 39.2 vzdálenosti $|AB|$ a $|BC|$ a píšeme

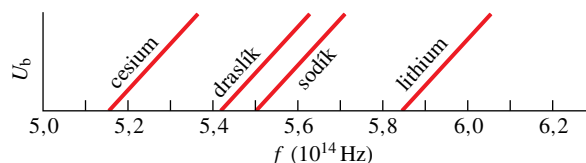
$$\frac{h}{e} = \frac{|AB|}{|BC|} = \frac{(2,35 - 0,72) \text{ V}}{(11,2 \cdot 10^{14} - 7,2 \cdot 10^{14}) \text{ Hz}} = 4,1 \cdot 10^{-15} \text{ V} \cdot \text{s}.$$

Vynásobením výsledku elementárním nábojem e dostaneme

$$h = (4,1 \cdot 10^{-15} \text{ V} \cdot \text{s})(1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}) = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}.$$

Tato hodnota Planckovy konstanty souhlasí s hodnotami měřenými pomocí jiných metod.

KONTROLA 2: Obrázek ukazuje data podobná obr. 39.2 pro terče z cesia, draslíku, sodíku a lithia. Přímky zobrazující závislosti jsou rovnoběžné. (a) Seřadte terče sestupně podle jejich výstupní práce. (b) Seřadte závislosti sestupně podle hodnoty h , kterou určují.



PŘÍKLAD 39.2

Fólie z draslíku je ve vzdálenosti $r = 3,5 \text{ m}$ od izotropního zdroje světla, který má výkon $P = 1,5 \text{ W}$. Výstupní práce pro draslík je $\Phi = 2,2 \text{ eV}$. Předpokládejte, že energie je přenášena dopadajícím světelným svazkem spojitě a plynule (tedy jako by platila klasická fyzika a fotony neexistovaly). Jak dlouho potrvá, než fólie vstřebá dostatek energie, aby mohla emitovat elektron? Předpokládejte, že fólie absorbuje všechnu dopadající energii a že elektron, který bude emitován, absorbuje energii dopadající na kruhovou plošku o poloměru $5,0 \cdot 10^{-11} \text{ m}$, daném typickým poloměrem atomu.

ŘEŠENÍ: Spočítáme si intenzitu I (výkon/plocha) světelné energie, dopadající na vzorek. Z ní můžeme snadno určit, za jak dlouho absorbuje studovaná ploška energii $2,2 \text{ eV}$.

Předpokládejme, že energie emitovaná ze zdroje je rozložena stejnoměrně v rozšiřující se kulové vlnoploše se středem ve zdroji. Z rov. (34.27) je intenzita světla v místě fólie

$$I = \frac{P}{4\pi r^2} = \frac{(1,5 \text{ W})}{4\pi(3,5 \text{ m})^2} = 9,74 \cdot 10^{-3} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}.$$

Dopadá-li na plochu $S = \pi(5,0 \cdot 10^{-11} \text{ m})^2 = 7,85 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2$ světlo s intenzitou I po dobu t , pohltí se energie $E = ISt = Rt$. Tok R energie ploškou „průřezu atomu“ je

$$R = IS = (9,74 \cdot 10^{-3} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2})(7,85 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2) = 7,65 \cdot 10^{-23} \text{ W}.$$

Jestliže tuto energii bude „nasávat“ jediný elektron, potřebuje k získání 2,2 eV dobu

$$t = \frac{\Phi}{R} = \frac{(2,2 \text{ eV})}{(7,65 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{s}^{-1})} \left(\frac{1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{1 \text{ eV}} \right) = 4600 \text{ s} \doteq 1,3 \text{ h}. \quad (\text{Odpověď})$$

Museli bychom tedy čekat více než hodinu od zapnutí zdroje světla na to, aby začaly být emitovány elektrony. Skutečná čekací doba je méně než 10^{-9} s. Elektron zřejmě nemusí čekat a postupně „sát“ energii z dopadající vlny; pohltí tuto energii celou naráz v jediné interakci fotonu s elektronem.

PŘÍKLAD 39.3

Nalezněte výstupní práci sodíku z dat vynesných v obr. 39.2.

ŘEŠENÍ: Prahová frekvence f_0 , při které graf v obr. 39.2 protíná osu frekvence, je přibližně $5,5 \cdot 10^{14}$ Hz. Fotony při této frekvenci mají energii přesně rovnou výstupní práci, a tak můžeme rov. (39.2) psát jako

$$E = hf_0 = \Phi,$$

což dává

$$\Phi = hf_0 = (6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})(5,5 \cdot 10^{14} \text{ Hz}) = 3,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 2,3 \text{ eV}. \quad (\text{Odpověď})$$

39.4 FOTONY MAJÍ HYBNOST

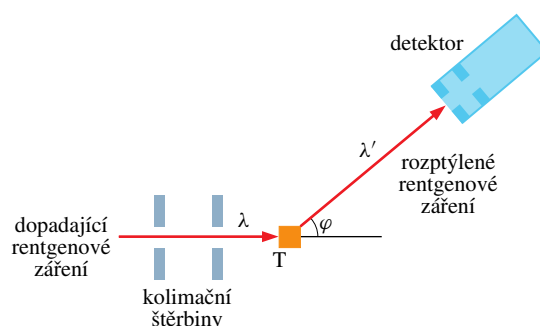
V roce 1916 rozšířil Einstein svou hypotézu o fotonech o předpoklad, že při interakci světla s hmotou předávají fotony nejen energii, ale i hybnost. Stejně jako energie se i hybnost předává po diskretních kvantech a v jednotlivých bodech namísto rozměrnějších oblastí prostoru.

Velikost hybnosti p fotonu spojeného s vlnou o frekvenci f je

$$p = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{hybnost fotonu}). \quad (39.7)$$

Rov. (39.2) ($E = hf = hc/\lambda$) a rov. (39.7) nám říkají například to, že fotony ve svazku rentgenového záření ($\lambda \approx 0,05 \text{ nm}$) mají mnohem větší hodnotu jak energie, tak hybnosti než fotony viditelného světla ($\lambda \approx 500 \text{ nm}$).

O několik let později, v roce 1923, prováděl Arthur Compton z Washingtonovy univerzity v St. Louis pokus, který podpořil názor, že jak hybnost, tak energie světla jsou předávány fotony. V tomto pokusu dopadal svazek rentgenového záření o vlnové délce λ na uhlíkový terč, jak ukazuje obr. 39.3. Compton měřil vlnové délky a intenzity rentgenových paprsků rozptýlených tímto terčem do různých směrů.



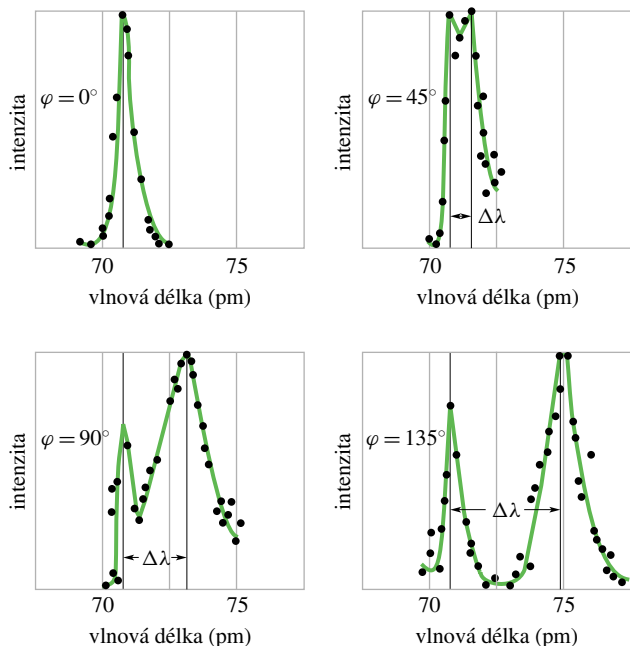
Obr. 39.3 Comptonovo zařízení. Svazek rentgenového záření o vlnové délce $\lambda = 71,1 \text{ pm}$ dopadá na uhlíkový terč T. Rentgenové záření rozptýlené na terči pozorujeme pro různé úhly φ vůči směru dopadajícího záření. Detektor měří jak intenzitu rozptýleného rentgenového záření, tak jeho vlnovou délku.

Obr. 39.4 ukazuje jeho výsledky. I když v dopadajícím svazku byla prakticky jediná vlnová délka ($\lambda = 71,1 \text{ pm}$), vidíme, že rozptýlený svazek obsahuje velký rozsah vlnových délek se dvěma výraznými píky v intenzitě. Jeden pík má střed kolem dopadající vlnové délky λ , druhý kolem jiné hodnoty λ' ; rozdíl $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ nazýváme **Comptonův posuv**. Hodnota Comptonova posuvu se mění s úhlem, pod kterým je rozptýlené rentgenové záření detegováno.

Obr. 39.4 je z pohledu klasické fyziky další záhada. Pokud považujeme dopadající svazek rentgenového záření za elektromagnetickou vlnu, musíme si představit elektrony v uhlíkovém terči, jak kmitají pod vlivem střídavého elektrického pole dopadající vlny. Elektron bude kmitat s frekvencí střídavého elektrického pole a — podobně jako maličká anténa rádiového vysílače — bude vyzařovat *na stejné frekvenci*. Rozptýlené rentgenové záření by mělo mít stejnou frekvenci, a tedy i stejnou vlnovou délku jako dopadající svazek. Ale nemá.

Compton interpretoval rozptyl rentgenových paprsků na uhlíku pomocí fotonů jako přenos energie a hybnosti mezi dopadajícím rentgenovým svazkem a volně vázanými elektrony v uhlíkovém terči. Podívejme se nejdříve kvalitativně a pak kvantitativně na to, jak kvantově mechanické představy vedou k pochopení Comptonových výsledků.

Předpokládejme, že interakce mezi dopadajícím rentgenovým svazkem a elektronem v klidu se účastní jediný



Obr. 39.4 Comptonovy výsledky pro čtyři hodnoty úhlu rozptylu φ . Všimněte si, že hodnota Comptonova posuvu $\Delta\lambda$ roste pro rostoucí úhel rozptylu φ .

foton o energii $E = hf$. Směr rentgenového záření se obecně změní (říkáme, že se rentgenový foton rozptyluje) a elektron se začne pohybovat. Elektron tedy získá jistou kinetickou energii. Protože se energie při interakci zachovává, musí být energie rozptýleného fotonu $E' = hf'$ menší než energie dopadajícího fotonu. Rozptýlené rentgenové záření tedy musí mít nižší frekvenci f' , a proto i delší vlnovou délku λ' , než dopadající rentgenové záření; to je v souladu s Comptonovým měřením na obr. 39.4. Tento druh rozptylu s posuvem frekvence nazýváme **Comptonův rozptyl**.

Při kvantitativním postupu nejprve použijeme zákon zachování energie. Obr. 39.5 znázorňuje „srážku“ mezi rentgenovým fotonem a volným elektronem, který je na počátku v klidu. Po srážce vystupuje rentgenové záření o vlnové délce λ' pod úhlem φ a elektron se pohybuje ve směru daném úhlem θ . Zákon zachování energie pak dává

$$hf = hf' + E_k,$$

kde hf je energie dopadajícího fotonu, hf' je energie rozptýleného fotonu a E_k je kinetická energie elektronu po srážce. Protože elektrony mohou získat rychlost srovnatelnou s rychlostí světla, musíme pro kinetickou energii elektronu použít relativistický vzorec podle rov. (38.33)

$$E_k = mc^2(\gamma - 1),$$

kde m je hmotnost elektronu a γ je Lorentzův koeficient

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}.$$

Dosažením za E_k do zákona zachování energie dostaneme

$$hf = hf' + mc^2(\gamma - 1)$$

a odtud dosažením $c/\lambda = f$ a $c/\lambda' = f'$ získáme

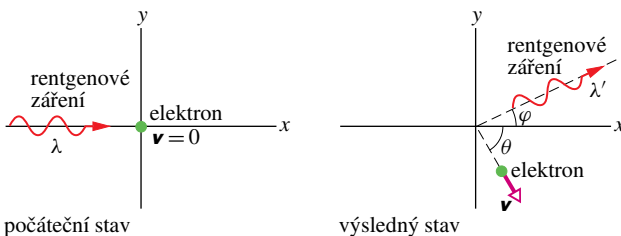
$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} + mc(\gamma - 1). \quad (39.8)$$

Dále použijeme (vektorově) zákon zachování hybnosti na srážku rentgenového fotonu s elektronem podle obr. 39.5. Hybnost dopadajícího a rozptýleného fotonu určuje rovnice (39.7) ($p = h/\lambda$) a hybnost elektronu po srážce rov. (38.31) ($p = \gamma mv$). Napíšeme-li zvlášť rovnice pro zachování složek hybnosti ve směru x a y , dostaneme

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \varphi + \gamma mv \cos \theta \quad (\text{složka } x) \quad (39.9)$$

a

$$0 = \frac{h}{\lambda'} \sin \varphi - \gamma mv \sin \theta \quad (\text{složka } y). \quad (39.10)$$



Obr. 39.5 Rentgenové záření o vlnové délce λ interaguje s elektronem v klidu. Rentgenový svazek je rozptýlen do úhlu φ a jeho vlnová délka vzroste na λ' . Elektron se pohybuje s rychlostí $\mathbf{v}$ pod úhlem θ .

Chceme najít výraz pro Comptonův posuv rozptýleného rentgenového záření $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$. Z pěti proměnných ($\lambda, \lambda', v, \varphi$ a θ), které vystupují v rov. (39.8), (39.9) a (39.10), vyloučíme v a θ , které se vztahují jen k elektronu po srážce. Po složitějších úpravách dostaneme závislost Comptonova posuvu na úhlu rozptylu φ :

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \varphi) \quad (\text{Comptonův posuv}). \quad (39.11)$$

Konstantní veličina $h/(mc)$ se nazývá **Comptonova vlnová délka** elektronu. Rov. (39.11) přesně souhlasí s Comptonovými experimentálními výsledky.

A pro úplnost...

Zbývá nám vysvětlit pík na vlnové délce dopadajícího záření ($\lambda = 71,1 \text{ pm}$) na obr. 39.4a. Ten nevzniká při rozptylu rentgenových paprsků na velmi volně vázaných elektronech v terči, ale při rozptylu na elektronech, které jsou *těsně* vázány k atomům uhlíku, z nichž je terč vyroben. Každá taková srážka je pak vlastně srážkou mezi dopadajícím rentgenovým fotonem a celým atomem uhlíku. Dosadíme-li za m v rov. (39.11) hmotnost atomu uhlíku (která je zhruba 22 000krát větší než hmotnost elektronu), vidíme, že posuv $\Delta\lambda$ je 22 000krát menší než Comptonův posuv pro elektron, a tedy příliš malý na to, abychom jej mohli zjistit. Proto pro rentgenové záření rozptýlené při těchto srážkách naměříme vlnovou délku stejnou, jako má dopadající rentgenové záření.

PŘÍKLAD 39.4

Rentgenové záření o vlnové délce $\lambda = 22 \text{ pm}$ (energie fotonu 56 keV) se rozptyluje na uhlíkovém terči pod úhlem 85° vůči dopadajícímu svazku.

(a) Jaký je Comptonův posuv rozptýleného svazku?

ŘEŠENÍ: Z rov. (39.11) máme

$$\begin{aligned}\Delta\lambda &= \frac{h}{mc}(1 - \cos\varphi) = \\ &= \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})(1 - \cos 85^\circ)}{(9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1})} = \\ &= 2,21 \cdot 10^{-12} \text{ m} \doteq 2,2 \text{ pm.} \quad (\text{Odpověď})\end{aligned}$$

(b) Jaká část α z počáteční energie rentgenového fotonu je při tomto rozptylu předána elektronu?

ŘEŠENÍ: Podíl ztráty energie je

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{E - E'}{E} = \frac{hf - hf'}{hf} = \frac{c/\lambda - c/\lambda'}{c/\lambda} = \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda'} = \\ &= \frac{\Delta\lambda}{\lambda + \Delta\lambda}.\end{aligned} \quad (39.12)$$

Dosazením dostaneme

$$\alpha = \frac{(2,21 \text{ pm})}{(22 \text{ pm} + 2,21 \text{ pm})} = 0,091 \text{ neboli } 9,1 \%. \quad (\text{Odpověď})$$

Ačkoli Comptonův posuv $\Delta\lambda$ nezávisí na vlnové délce λ dopadajícího rentgenového záření (rov. (39.11)), *relativní* ztráta energie rentgenového záření závisí na λ . Jak ukazuje rov. (39.12), relativní ztráta roste, když se vlnová délka dopadajícího záření zmenšuje.

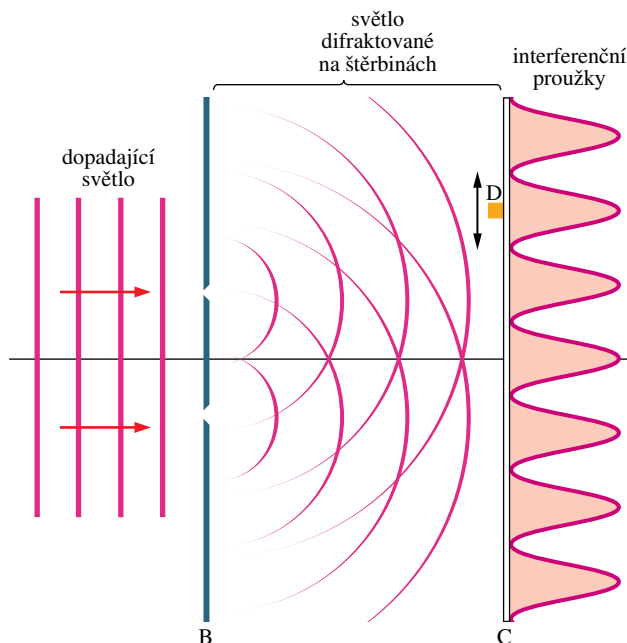
(a) Comptonův posuv, (b) relativní posuv vlnové délky, (c) relativní změna energie fotonu a (d) energie předaná elektronu?

39.5 SVĚTLO JAKO VLNA PRAVDĚPODOBNOSTI

Může se to zdát podivné, že světlo může být vlna a přesto vzniká a při interakci zaniká jako určité kvantum energie — foton. Nový pohled na pokus s dvojštěrbinou z čl. 36.4 nám pomůže tuto záhadu objasnit. Budeme uvažovat tři verze tohoto důležitého pokusu.

Standardní verze

Obr. 39.6 nám připomene původní pokus prováděný Thomasem Youngem v roce 1801, který jsme viděli na obr. 36.6. Světlo dopadá na stínítko B se dvěma úzkými rovnoběžnými štěrbinami. Světelné vlny vycházejí z obou štěrbin, původně jediný směr šíření se rozšíří difrakcí, takže se po dopadu na stínítko C překrývají. Interferencí vzniká obrazec, kde se střídají minima a maxima intenzity. V čl. 36.4 jsme brali existenci těchto interferenčních proužků jako důkaz vlnové podstaty světla.



Obr. 39.6 Světlo dopadá na stínítko B, které obsahuje dvě rovnoběžné štěrbin. Světlo na nich difraktuje. Obě difraktované vlny dopadají na stínítko C, skládají se a vytvářejí interferenční proužky. Malý detektor fotonů D v rovině stínítka C klapne pokaždé, když absorbuje foton.

KONTROLA 3: Srovnajte Comptonův rozptyl pro rentgenové záření ($\lambda \doteq 20 \text{ pm}$) a viditelné světlo ($\lambda \doteq 500 \text{ nm}$) pro daný úhel rozptylu. Kde je větší

Do jednoho bodu v rovině stínítka umístíme malý detektor fotonů D — například fotoelektrické zařízení, které klapne, když pohltí foton. Detektor bude v náhodné okamžiky klapat a každé klapnutí signalizuje přenos energie od světelné vlny na stínítko — dopad jednoho fotonu.

Posouváme-li velmi pomalu detektor nahoru a dolů, jak je znázorněno na obr. 39.6, bude se četnost klapání zvětšovat a zmenšovat tak, jak bude detektor postupně procházet maximy a minimy, která přesně odpovídají poloze maxim a minim v interferenčních proužcích.

Co je podstatou tohoto myšleného experimentu? Nedokážeme předpovědět, kdy bude foton detegován v daném bodě na stínítku C; fotony jsou detegovány v každém bodě v náhodných časových okamžicích. Můžeme však předpovědět, že *pravděpodobnost*, že foton bude detegován v daném bodě v zadaném časovém intervalu, je úměrná intenzitě světla dopadajícího na stínítko C.

V čl. 34.4 jsme viděli, že intenzita I světelné vlny je v každém bodě úměrná čtverci amplitudy E_m proměnného elektrického pole.

Pravděpodobnost, že foton bude detegován (za jednotku času) v malém objemu se středem v daném bodě světelné vlny, je úměrná čtverci amplitudy vektoru intenzity elektrického pole v tomto bodě.

Tím jsme vytvořili pravděpodobnostní popis světelné vlny, a tedy jiný způsob, jak se dívat na světlo. Je to nejen elektromagnetická vlna, ale i **vlna!pravděpodobnosti**. To znamená, že každému bodu světelné vlny můžeme přiřadit číslo – pravděpodobnost (za jednotku času), že foton může být detegován v malém objemu kolem tohoto bodu.

Jednofotonová verze

Jednofotonovou verzi pokusu s dvojštěrbinou poprvé provedl G. I. Taylor v roce 1909 a pokus byl od té doby mnohokrát zopakován. Od standardní verze se liší tím, že zdroj světla je natolik slabý, že další foton je náhodně emitován až poté, co předcházející foton dopadl na stínítko. Překvapivě se na stínítku C stále vytvářejí interferenční proužky, pokud pokus probíhá dostatečně dlouho (v Taylorově prvním pokusu to bylo po dobu několika měsíců).

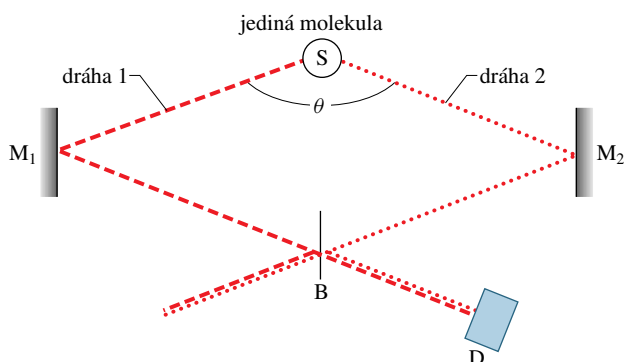
Jak můžeme tento jednofotonový dvojštěrbinový pokus vysvětlit? Dříve, než se vůbec pustíme do interpretace výsledků, měli bychom si položit otázky jako: Když se v aparatuře pohybuje jediný foton, kterou štěrbinou ve stínítku B prochází? Jak tento foton „ví“, že se někde vyskytuje další štěrbinou, a že tedy může interferovat? Může jediný foton nějak projít oběma štěrbinami a interferovat sám se sebou?

Mějme na paměti, že fotony se projevují jen při interakci světla s hmotou. Víme tedy, že fotony *vznikají* ve zdroji, který vytváří dopadající světlo na obr. 39.6, a že *zánikají* na stínítku C, kde světlo interaguje s pevnou látkou, ze které je stínítko složeno. Mezi zdrojem a detektorem však *postulujeme*, že se světlo pohybuje *ne* jako tok fotonů, ale jako vlna pravděpodobnosti. Tato vlna může difraktovat na každé cloně nezávisle na tom, jak slabý je zdroj světla. Obě difraktované vlny, každá od jedné štěrbiny, spolu mohou interferovat, když se setkají v daném bodě stínítka C, kde pak na stínítku vytvářejí maxima a minima „proužků pravděpodobnosti“. Fotony pak budeme přednostně detegovat v oblastech maximální pravděpodobnosti. V oblastech minima, kde je pravděpodobnost nulová, detegovány nebudou.

Toto vypadá jako uspokojivé vysvětlení jednofotonového pokusu, neboť klasická fyzika nenabízí vůbec žádné vysvětlení. Podle známého fyzika Richarda Feynmana je jednofotonový pokus na dvojštěrbině jev, který není možné, *absolutně* není možné, vysvětlit klasickým způsobem a který je vlastní povaze kvantové fyziky.

Jednofotonová širokoúhlá verze

Obr. 39.7 ukazuje uspořádání v další verzi dvojštěrbinového pokusu, který provedli Ming Lai a Jean-Claude Diels na Univerzitě v Novém Mexiku v roce 1992. Zdroj S obsahuje molekuly, které emitují jednotlivé fotony dostatečně dlouho po sobě. Zrcadla M_1 a M_2 odrážejí světlo emitované ze zdroje tak, že prochází po dvou různých drahách 1 a 2 svírajících úhel θ blízký 180° . Toto uspořádání se liší od standardního dvojštěrbinového pokusu, u něhož je velmi malý úhel mezi oběma drahami světelných vln dopadajících na obě štěrbinu.



Obr. 39.7 Světlo jediného fotonu emitované ze zdroje S se pohybuje po dvou vzdálených drahách a interferuje samo se sebou na detektoru D po spojení na děliči svazku B. (Ming Lai and Jean-Claude Diels, *Journal of the Optical Society of America B*, 9, 2290–2294, December 1992.)

Po odrazu od zrcadel M_1 a M_2 se světelné vlny, pohybující se podél drah 1 a 2, setkávají na děliči svazku B. (*Dělič svazku* je optické zařízení, které propouští polovinu dopadajícího světla a odráží druhou polovinu.) Na pravé straně děliče z obr. 39.7 se světelná vlna, která se pohybovala po dráze 2 a odrazila od B, spojuje se světelnou vlnou, která se pohybovala po dráze 1 a prošla děličem B. Obě tyto vlny pak spolu interferují při dopadu na detektor D (*fotonásobič* detegující jednotlivé fotony).

Výstup z detektoru je série náhodně rozložených elektrických pulzů; každý pulz signalizuje detekci jednoho fotonu. V pokusu se dělič B pomalu pohybuje ve vodorovném směru (zde maximálně jen asi o $50\text{ }\mu\text{m}$) a výstup z detektoru se zaznamenává na zapisovači. Posun děliče B mění délku dráhy 1 a 2 a vytváří fázový rozdíl mezi světelnými vlnami, které dopadají na detektor D. Na výstupním signálu z detektoru se objevují interferenční maxima a minima.

Tento pokus se dá těžko pochopit pomocí tradičních pojmů. Například emituje-li molekula jediný foton, pohybuje se foton po dráze 1 nebo po dráze 2 v obr. 39.7 (nebo po nějaké zcela jiné dráze)? Může se snad současně pohybovat po obou drahách? Abychom našli odpověď, předpokládáme, že emitující molekula při kvantovém přechodu na nižší hladinu energie vyzařuje vlnu pravděpodobnosti do všech směrů. Pokus vzorkuje tuto vlnu ve dvou směrech, zvolených tak, že jsou prakticky protilehlé.

Vidíme, že všechny tři verze pokusu na dvojštěrbíně můžeme interpretovat, předpokládáme-li, že (1) světlo ve zdroji vzniká jako jednotlivé fotony, (2) světlo se v detektoru pohlcuje jako jednotlivé fotony a (3) světlo se pohybuje mezi zdrojem a detektorem jako vlna pravděpodobnosti.

39.6 ELEKTRONY A DE BROGLIEHO VLNY

Fyzikové jen zřídka udělali chybu, když předpokládali symetrii v přírodě. Zjistíme-li, že proměnné magnetické pole vytváří elektrické pole, můžeme usuzovat jako Faraday a Maxwell, že proměnné elektrické pole vytváří pole magnetické. A ono ho také vytváří.

V roce 1924 se francouzský fyzik Louis de Broglie rovněž dovolával symetrie. Svazek světla je vlna, ale předává energii a hybnost hmotě v kvantech — fotonech. Proč nemohou mít svazky částic podobné vlastnosti? Proč nemůžeme považovat pohybující se elektron — nebo jakoukoli jinou částici — za **vlnu hmoty**?

De Broglie navrhl, že rov. (39.7) ($p = h/\lambda$) neplatí jen pro fotony, ale také pro hmotné částice — například pro elektrony. V čl. 39.4 jsme použili tuto rovnici, abychom přiřadili fotonu hybnost p , známe-li vlnovou délku λ vlny

příslušné fotonu. Nyní tento vztah použijeme ve tvaru

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{de Broglieho vlnová délka}) \quad (39.13)$$

k přiřazení vlnové délky λ částici, která má hybnost o velikosti p . Vlnová délka určená rov. (39.13) se nazývá **de Broglieho vlnová délka** pohybující se částice.

De Broglieho hypotézu o existenci vlnových vlastností hmoty poprvé experimentálně ověřili v roce 1927 C. J. Davisson a L. H. Germer z Bellových laboratoří a George P. Thomson z Aberdeenské univerzity ve Skotsku. V roce 1989 byla vlnová podstata elektronů demonstrována i pokusem s dvojštěrbinou, kterou jsme použili pro diskusi vlnové podstaty světla.

Obr. 39.8 je fotografický důkaz existence vln hmoty, **de Broglieho vln**, v nedávno provedeném experimentu. V tomto experimentu byl vytvářen interferenční obrazec elektrony, posílanými *jeden za druhým* zařízením s dvojštěrbinou. Toto zařízení bylo podobné, jaké jsme používali dříve pro demonstrování optické interference, až na to, že pozorovací stínítko pracovalo stejně jako obvyklá televizní obrazovka. Když elektron dopadne na stínítko, vyvolá světelný záblesk a jeho poloha je zaznamenána.

Prvních několik elektronů neodhalilo nic zajímavého; zdánlivě dopadaly na stínítko v náhodných bodech (dva horní obrázky). Po dopadu několika tisíc elektronů se na obrazovce objevuje obrazec se světlými proužky v místech, kam dopadlo mnoho elektronů, a s tmavými, kam dopadlo elektronů málo. Tento obrazec je přesně to, co bychom očekávali při interferenci vln. To znamená, že *každý* elektron prošel zařízením jako de Broglieho vlna; část, která prošla jednou štěrbinou, interferovala s částí, která prošla druhou štěrbinou. Tato interference pak určila pravděpodobnost, že se elektron při dopadu objeví v daném bodě stínítka. Mnoho elektronů dopadlo do oblastí odpovídajících jasným proužkům při optické interferenci, málo elektronů dopadlo do oblastí odpovídajících tmavým proužkům.

Podobné interference byly pozorovány pro protony, neutrony a řadu atomů. V roce 1994 byly prokázány i pro molekuly jodu I_2 , které jsou nejen 500 000krát hmotnější než elektrony, ale jsou i mnohem složitější. V roce 1999 byly interference demonstrovány i pro mnohem složitější *fulerény* (*buckyballs*) C_{60} a C_{70} . (Fulerény jsou molekuly, které vypadají jako fotbalový míč vytvořený ze 60, resp. 70 atomů uhlíku.) Takové malé objekty, jako jsou elektrony, protony, atomy a molekuly, se zřejmě pohybují jako de Broglieho vlny. Když však uvažujeme větší a složitější objekty, musíme dojít k tomu, že již přestává mít smysl uvažovat vlnovou podstatu objektu. Pak se dostáváme do našeho známého nekvantového světa, jehož fyzikálními vlastnostmi jsme

se věnovali v předchozích kapitolách. Krátce, elektron je de Broglieho vlna a může interferovat sám se sebou, ale kočka není de Broglieho vlna a nemůže sama se sebou interferovat (což musí být pro kočky velká úleva).

Obr. 39.9a ukazuje jiný pokus, který můžeme použít pro demonstraci rozptylu buď elektronů, nebo rentgenového záření na krystalech. Svazek částic jednoho nebo druhého druhu dopadá na terč tvořený práškem s malými krystalky hliníku. Rentgenové záření má jistou vlnovou délku λ . Elektrony mají energii takovou, aby jejich vlnová délka λ byla stejná. Po rozptylu na krystalech má vystupující svazek válcovou symetrii kolem počátečního směru dopadu a v důsledku Braggova rozptylu na atomových rovinách hliníku (viz čl. 37.9) vytváří soustředné kroužky na fotografickém filmu. Obr. 39.9b ukazuje výsledky pro rentgenové záření, obr. 39.9c ukazuje výsledky pro svazek elektronů. Geometrie kroužků je stejná a ukazuje, že jak rentgenové záření, tak elektrony se chovají v tomto pokusu jako vlny.

V současné době považujeme vlnovou podstatu hmoty za samozřejmou. Difrakce elektronů nebo neutronů se běžně používá pro studium atomové struktury pevných látek a kapalin. De Broglieho vlny jsou při tomto studiu důležitým doplňkem rentgenového záření. Elektrony pronikají do menší hloubky než rentgenové záření, a jsou proto užitečné pro studium vlastností povrchů. Rentgenové záření interaguje ve vzorku zejména s elektrony, a proto není vhodné pro určení polohy atomů o malé hmotnosti (především vodíku), které mají málo elektronů. Naproti tomu neutrony interagují s jádry atomů v terči, a jsou proto užitečné tam, kde nelze použít rentgenové záření.

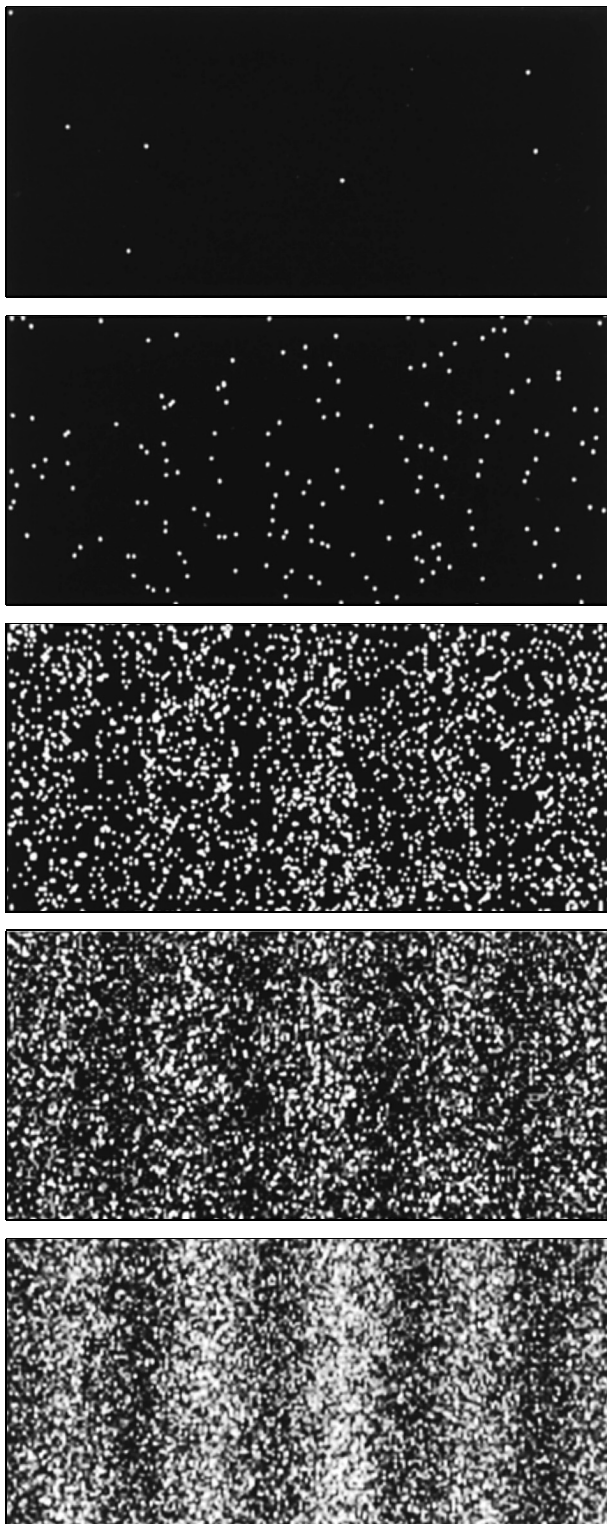
Obr. 39.10 ukazuje strukturu tuhého benzenu, jak ji můžeme určit pomocí difrakce neutronů. Každý ze soustředných modrých kroužků ukazuje polohu jednoho ze šesti atomů uhlíku, které vytvářejí známý benzenový kruh. Každý červený kroužek pak ukazuje polohu atomu vodíku vázaného k atomu uhlíku.

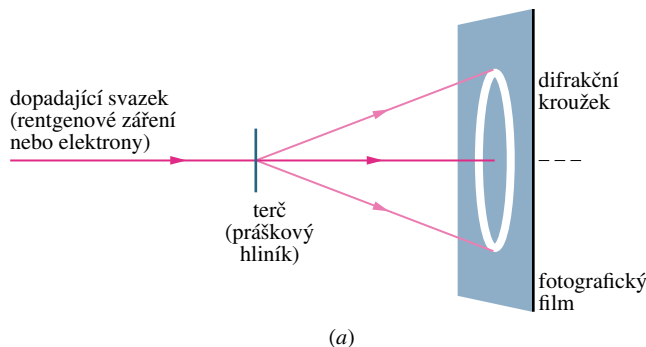
Vlny a částice

Obr. 39.8, 39.9 a 39.10 přesvědčivě dokazují vlnovou podstatu hmoty. Máme ale nejméně stejně tolik pokusů, které svědčí o částicové podstatě hmoty. Vezměme si jako příklad stopy vytvořené elektrony z úvodního obrázku k této kapitole. Tyto stopy — řada bublinek vytvořených v bublinkové komoře naplněné kapalným vodíkem — naznačují průchod částice. Kde je tedy ta vlna?

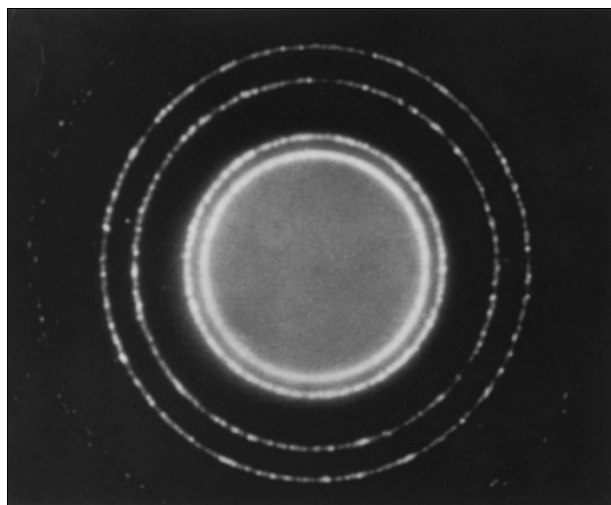
Abychom si zjednodušili situaci, vypneme magnetické pole, takže řada bublinek bude ležet na přímce. Každou bublinku můžeme považovat za bod detekce elektronu. De Broglieho vlny, které se pohybují mezi dvěma body de-

Obr. 39.8 Vytváření interferenčního obrazce pomocí svazku elektronů při pokusu na dvojštěrbíně podobně jako na obr. 39.6. De Broglieho vlny jsou stejně jako světelné vlny vlnami pravděpodobnosti. Shora dolů je přibližný počet elektronů v obrazech 7, 100, 3 000, 20 000 a 70 000.

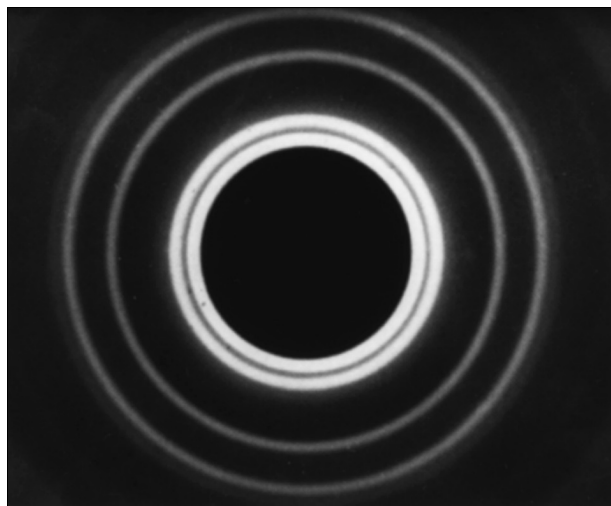




(a)

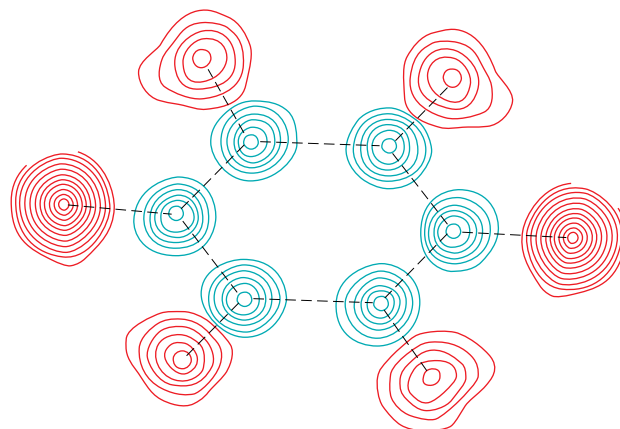


(b)



(c)

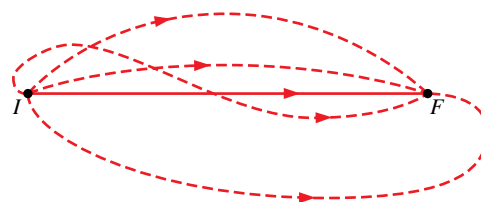
Obr. 39.9 (a) Experimentální uspořádání pro demonstraci vlnového charakteru dopadajícího svazku. (b) Difrakční obrazec pro dopadající rentgenový svazek (elektromagnetická vlna). (c) Difrakční obrazec pro dopadající svazek elektronů („vlna hmoty“). Základní geometrie obou obrazců je shodná.



Obr. 39.10 Atomová struktura benzenu zobrazená pomocí difrakce neutronů. Uzavřené křivky ukazují hustotu elektronů v pevném terči. Můžeme snadno vidět známý benzenový kruh se šesti atomy uhlíku (modře) a k nim vázané atomy vodíku (červeně).

tekce, jako jsou I a F na obr. 39.11, prozkoumávají všechny možné dráhy, z nichž některé jsou znázorněny.

Obecně pro každou dráhu spojující body I a F bude existovat blízká dráha taková, že vlny sledující obě dráhy se vyruší interferencí. To ale neplatí pro přímku spojující body I a F ; v tomto případě vlny na sousedních drahách zesilují vlnu postupující po přímce. Bublinky vytvářející stopu částice pak můžeme považovat za sérii detekčních bodů, ve kterých částicová vlna prodělala konstruktivní interferenci.



Obr. 39.11 Několik z mnoha drah spojujících body I a F , ve kterých jsou částice detegovány. Pouze ty částicové vlny, které sledují dráhy blízké přímce spojující oba body, interferují tak, že se sčítají. Pro všechny další dráhy se vlny sledující sousední dráhy interferencí vyruší. Proto částicová vlna sleduje přímkovou dráhu.

PŘÍKLAD 39.5

Jaká je vlnová délka de Broglieho vlny elektronu, jehož kinetická energie je 120 eV?

ŘEŠENÍ: De Broglieho vlnovou délku najdeme z rovnice (39.13) ze známé hybnosti elektronu. Z nerelativistického vztahu $E_k = \frac{1}{2}mv^2$ můžeme ukázat, že pro $E_k = 120 \text{ eV}$ je $v = 6,5 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, což je velikost dostatečně malá vzhledem k rychlosti světla. To nám dovoluje použí-

vat nerelativistické vztahy jak pro kinetickou energii, tak pro hybnost ($p = mv$). Vyloučíme-li rychlost v v obou výrazech, dostaneme

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{2mE_k} = \\ &= \sqrt{2(9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(120 \text{ eV})(1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV})} = \\ &= 5,91 \cdot 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}. \end{aligned}$$

Z rov. (39.13) pak je

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{p} = \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})}{(5,91 \cdot 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1})} = \\ &= 1,12 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 112 \text{ pm}. \quad (\text{Odpověď}) \end{aligned}$$

To odpovídá typické velikosti atomu.

KONTROLA 4: Elektron a proton mají stejnou (a) kinetickou energii, (b) hybnost, (c) rychlost. Která z částic má v každém vyjmenovaném případě kratší de Broglieho vlnovou délku?

39.7 SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

Jednoduchá vlna libovolného typu, ať už je to vlna na struně, zvuková vlna nebo světelná vlna, je popsána pomocí nějaké veličiny, která se mění v prostoru a čase způsobem typickým pro vlnu. Například pro světelné vlny je takovouto veličinou $\mathbf{E}(x, y, z, t)$, elektrická složka vlny. Pozorovaná hodnota v libovolném bodě pak záleží na souřadnicích tohoto bodu a na čase, ve kterém se provádí pozorování.

Jakou proměnnou veličinou máme popsat de Broglieho vlnu? Můžeme čekat, že tato veličina, které budeme říkat **vlnová funkce** $\Psi(x, y, z, t)$, bude složitější než odpovídající veličina pro světlo, protože de Broglieho vlna kromě energie a hybnosti také přenáší hmotnost a často i elektrický náboj. Ukazuje se, že funkce Ψ (velké řecké písmeno *psi*) je v matematickém smyslu komplexní funkce; to znamená, že její hodnoty můžeme psát jako $a + ib$, kde a a b jsou reálná čísla a $i^2 = -1$.

Ve všech případech, se kterými se v dalším setkáme, mohou být prostorové a časové proměnné separovány a Ψ můžeme psát ve tvaru součinu

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-i\omega t}, \quad (39.14)$$

kde $\omega = 2\pi f$ je úhlová frekvence de Broglieho vlny. Funkce ψ (malé řecké písmeno *psi*) představuje jen prostorově závislou část úplné, i na čase závislé funkce Ψ . V dalším se takřka výlučně budeme zabývat funkcí ψ . Vznikají pak dvě otázky: co znamená vlnová funkce a jak ji najdeme?

Co znamená vlnová funkce? De Broglieho vlna je podobně jako světelná vlna vlnou pravděpodobnosti. Předpokládejme například, že hmota dopadá na malý detektor částic; potom pravděpodobnost, že částice bude detegována v určitém časovém intervalu, je úměrná $|\psi|^2$, kde $|\psi|$ je absolutní hodnota vlnové funkce v místě detektoru. I když ψ je obvykle komplexní veličina, $|\psi|^2$ je vždycky reálná, a to nezáporná. *Fyzikální smysl* má tedy nikoli samotné ψ , ale veličina $|\psi|^2$, které říkáme **hustota pravděpodobnosti**. Vlně řečeno:

Pravděpodobnost detekce částice (za jednotku času) v malém objemu se středem v daném bodě je pro de Broglieho vlny úměrná hodnotě $|\psi|^2$ v tomto bodě.

Protože funkce ψ je obvykle komplexní, čtverec její absolutní hodnoty najdeme vzájemným vynásobením funkce ψ a funkce ψ^* , *komplexně sdružené* k funkci ψ . (Pro nalezení ψ^* nahradíme imaginární jednotku „i“ při každém výskytu v ψ výrazem $-i$.)

Jak najdeme vlnovou funkci? Zvukové vlny a vlny na struně jsou popsány rovnicemi newtonovské mechaniky. Světelné vlny jsou popsány Maxwellovými rovnicemi. De Broglieho vlny jsou popsány **Schrödingerovou rovnicí**, kterou zavedl v roce 1926 rakouský fyzik Erwin Schrödinger.

V mnoha případech, které budeme diskutovat, se budeme zabývat pohybem částice podél osy x v oblasti, ve které působení síly na částici lze popsat změnou potenciální energie $E_p(x)$ částice. Schrödingerova rovnice se pak zjednoduší na tvar

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - E_p(x)]\psi = 0$$

(Schrödingerova rovnice
pro pohyb v jednom rozměru), (39.15)

kde E je celková mechanická energie (součet potenciální a kinetické energie) pohybující se částice. Schrödingerovu rovnici nemůžeme odvodit ze základnějších principů; je sama základní princip. S ostatními principy ovšem souvisí (problém 86).

Je-li $E_p(x)$ v rov. (39.15) rovna nule, pak tato rovnice popisuje **vlnou částici**, tedy takovou pohybující se částici, na kterou nepůsobí žádné síly. Celková energie částice je v tomto případě rovna její kinetické energii, a tedy E v rov. (39.15) je $\frac{1}{2}mv^2$. Rovnice pak má tvar

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{mv^2}{2} \right) \psi = 0.$$

Po dosazení $p = mv$ ji můžeme přepsat do tvaru

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \psi = 0.$$

Podle rov. (39.13) je výraz $p/\hbar$ roven $1/\lambda$, kde λ je de Broglieho vlnová délka pohybující se částice. Dále víme, že $2\pi/\lambda$ je úhlový vlnčet* k , definovaný v rov. (17.5). Po dosazení do předchozí rovnice dostaneme

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (\text{Schrödingerova rovnice pro volnou částici}). \quad (39.16)$$

Rov. (39.16) má obecné řešení

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (39.17)$$

kde A a B jsou libovolné konstanty. Snadno ukážeme, že toto je skutečně řešením rov. (39.16), protože dosazením $\psi(x)$ a její druhé derivace dostaneme identitu.

Dosazením rov. (39.17) do rov. (39.14) najdeme, že časově závislá vlnová funkce Ψ volné částice pohybující se podél osy x je

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \psi(x)e^{-i\omega t} = \\ &= (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-i\omega t} = \\ &= Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}. \end{aligned} \quad (39.18)$$

Nalezení hustoty pravděpodobnosti $|\psi|^2$

Z čl. 17.5 víme, že každá funkce tvaru $F(kx \pm \omega t)$ představuje postupnou vlnu. To platí jak pro exponenciální funkci v rov. (39.18), tak pro sinusovou závislost, kterou jsme dosud používali pro popis vlnění struny. Obě vyjádření spolu souvisí pomocí vztahů

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad \text{a} \quad e^{-i\theta} = \cos \theta - i \sin \theta,$$

kde θ je libovolný úhel.

První člen na pravé straně rov. (39.18) představuje vlnu pohybující se v kladném směru osy x a druhý člen vlnu pohybující se v záporném směru osy x . Obecné řešení (rov. (39.18)) převedeme na případ pohybu v kladném směru osy x tak, že položíme konstantu B v rov. (39.18) a (39.17) rovnu nule, a současně označíme konstantu A jako ψ_0 . Rov. (39.17) pak dostane tvar

$$\psi(x) = \psi_0 e^{ikx}. \quad (39.19)$$

Pro spočtení hustoty pravděpodobnosti musíme určit čtverec absolutní hodnoty $\psi(x)$. Dostaneme

$$|\psi|^2 = |\psi_0 e^{ikx}|^2 = (\psi_0^2) |e^{ikx}|^2.$$

* V kvantové fyzice se úhlový vlnčet k často nazývá vlnové číslo.

Protože

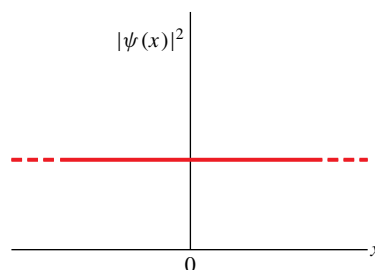
$$|e^{ikx}|^2 = (e^{ikx})(e^{ikx})^* = e^{ikx - ikx} = e^0 = 1,$$

dostaneme

$$|\psi|^2 = (\psi_0^2)(1)^2 = \psi_0^2.$$

Obr. 39.12 znázorňuje závislost hustoty pravděpodobnosti $|\psi|^2$ na x pro volnou částici — je to přímka rovnoběžná s osou x od $-\infty$ do $+\infty$. Vidíme, že hustota pravděpodobnosti $|\psi|^2$ je stejná pro všechny hodnoty x , což znamená, že částice má stejnou pravděpodobnost být kdekoli podél osy x . Žádná poloha částice tedy není preferována.

Význam tohoto tvrzení si ozřejmíme v další části.



Obr. 39.12 Graf hustoty pravděpodobnosti $|\psi|^2$ pro volnou částici pohybující se v kladném směru osy x . Protože $|\psi|^2$ má stejnou konstantní hodnotu pro všechny hodnoty x , částice má v každém bodě stejnou pravděpodobnost, že bude detegována.

39.8 HEISENBERGŮV PRINCIP NEURČITOSTI

To, že volná částice v obr. 39.12 nemá žádnou preferovanou polohu, je náš první příklad použití **Heisenbergova principu neurčitosti**, který postuloval v roce 1927 německý fyzik Werner Heisenberg. Tento princip říká, že částici nelze současně přiřadit polohu $\mathbf{r}$ a hybnost $\mathbf{p}$ s neomezenou přesností.

Heisenbergův princip neurčitosti stanoví pro složky $\mathbf{r}$ a $\mathbf{p}$ tyto meze:

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq \hbar, \\ \Delta y \Delta p_y &\geq \hbar, \\ \Delta z \Delta p_z &\geq \hbar \end{aligned} \quad (\text{Heisenbergův princip neurčitosti}). \quad (39.20)$$

Zde např. Δx a Δp_x jsou neurčitosti pro měření x -ových složek $\mathbf{r}$ a $\mathbf{p}$. I s těmi nejlepšími měřicími zařízeními, která nám může poskytnout moderní technika, bude každý součin neurčitosti polohy a neurčitosti hybnosti v rov. (39.20) větší než $\hbar$; nikdy nemůže být menší.

Částice, jejíž hustota pravděpodobnosti je znázorněna na obr. 39.12, je volná částice. To znamená, že na ni nepůsobí žádná síla, takže její hybnost $\mathbf{p}$ musí být konstantní. Přitom jsme předpokládali, aniž jsme to výslovně řekli, že $\mathbf{p}$ můžeme určit absolutně přesně. Tím jsme ovšem předpokládali, že v rov. (39.20) je $\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = 0$. Tento předpoklad však vyžaduje, aby $\Delta x \rightarrow \infty$, $\Delta y \rightarrow \infty$ a $\Delta z \rightarrow \infty$. S touto nekonečně velkou neurčitostí je pak nemožné určit polohu částice, jak to také ukazuje obr. 39.12.

Nemůžeme si tedy myslet, že částice má ve skutečnosti nějakou přesně určenou polohu, která je před námi z nějakého důvodu skryta. Jestliže je hybnost částice určena s absolutní přesností, slova jako „poloha částice“ jednoduše ztrácejí jakýkoli smysl. Částice z obr. 39.12 může být nalezena se stejnou pravděpodobností kdekoli podél osy x .

PŘÍKLAD 39.6

Snadno ukážeme, že elektron s kinetickou energií 12,0 eV má rychlost $2,05 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Předpokládejme, že se elektron pohybuje ve směru osy x a že můžeme měřit jeho rychlost s přesností 0,50 %. Jaká je nejmenší neurčitost (podle Heisenbergova principu neurčitosti), se kterou můžeme současně měřit polohu elektronu podél osy x ?

ŘEŠENÍ: Rychlost elektronu je mnohem menší než rychlost světla, a proto můžeme jeho hybnost určit z nerelativistického vztahu jako

$$p = p_x = mv = (9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(2,05 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}) = 1,87 \cdot 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}.$$

Neurčitost Δp_x při měření hybnosti je 0,50 % této hodnoty, tedy $9,35 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$. Podle Heisenbergova principu neurčitosti (rov. (39.20)) je minimální neurčitost pro měření polohy

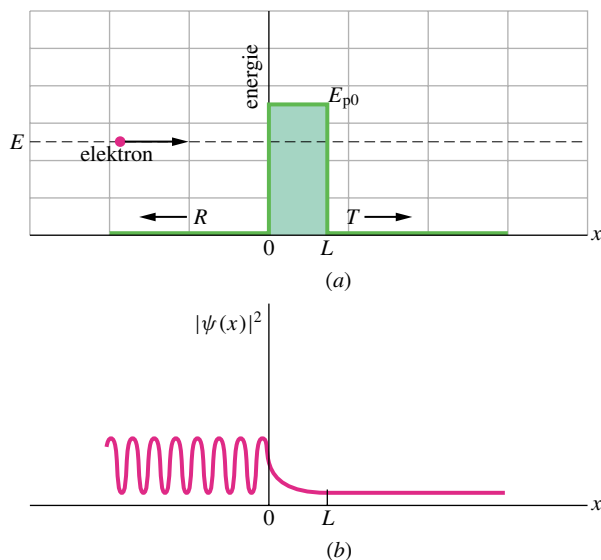
$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{\Delta p_x} = \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})/2\pi}{(9,35 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1})} = 1,13 \cdot 10^{-8} \text{ m} \doteq 11 \text{ nm}, \quad (\text{Odpověď})$$

to je asi 100 průměrů atomu. S danou neurčitostí měření hybnosti nemá smysl snažit se určit polohu elektronu s větší přesností.

39.9 TUNELOVÁNÍ

Představte si, že házíte lentilky po stole, na kterém někde v jejich dráze leží kniha. Byli byste velice překvapeni, kdyby lentilka prošla knihou místo toho, aby se od ní

odrazila. Něco takového od lentilek očekávat nemůžeme. Ale pro elektrony a jiné částice s malou hmotností takový jev, kterému se říká tunelování bariérou nebo prostě jen **tunelování**, nastat může.



Obr. 39.13 (a) Průběh závislosti energie v prostoru vytváří potenciálovou bariéru o výšce E_{p0} a tloušťce L . Elektron o celkové energii E se přibližuje k bariéře zleva. (b) Hustota pravděpodobnosti $|\psi|^2$ de Broglieho vlny reprezentující elektron ukazuje tunelování elektronu bariérou. Vlevo od bariéry dostaneme stojatou vlnu v důsledku superpozice dopadající a odražené de Broglieho vlny.

Obr. 39.13a ukazuje elektron o energii E , který se pohybuje ve směru osy x . Působí na něj takové síly, že jeho potenciální energie E_p je nulová všude kromě oblasti $0 < x < L$, kde má hodnotu E_{p0} . Takové oblasti říkáme **bariéra potenciální energie** (nebo volněji **potenciálová bariéra**) o výšce E_{p0} a tloušťce L .

Protože $E < E_{p0}$, měl by se podle klasické fyziky elektron, který se k bariéře přibližuje zleva, od bariéry odrazit a pohybovat se zpět proti původnímu směru pohybu. V kvantové fyzice je však v tomto případě elektron de Broglieho vlnou, a proto existuje jistá nenulová pravděpodobnost, že tato vlna „prosákne“ bariérou a ocitne se na druhé straně. To znamená, že existuje konečně velká pravděpodobnost, že se elektron ocitne na vzdálené straně bariéry a bude pokračovat v pohybu vpravo.

Vlnová funkce $\psi(x)$, která popisuje elektron, se najde řešením Schrödingerovy rovnice (39.15) samostatně pro tři oblasti znázorněné na obr. 39.13a: (1) vlevo od bariéry, (2) uvnitř bariéry a (3) vpravo od bariéry. Konstanty, které se v řešení objeví, určíme tak, aby funkce $\psi(x)$ byla hladká

(tzn. spojitá i se svou derivací) i v bodech $x = 0$ a $x = L$. Čtverec absolutní hodnoty $\psi(x)$ pak udává hustotu pravděpodobnosti.

Obr. 39.13b ukazuje výsledky graficky. Oscilující křivka vlevo od bariéry z obr. 39.13a (pro $x < 0$) je kombinací dopadající a odražené de Broglieho vlny. Odražená vlna má menší amplitudu než dopadající vlna a interferencí se vytvoří stojatá vlna.

Uvnitř bariéry (pro $0 < x < L$) klesá hustota pravděpodobnosti exponenciálně v závislosti na x . Předpokládáme-li však, že L je malé, není hustota pravděpodobnosti v $x = L$ zanedbatelná.

Vpravo od bariéry z obr. 39.13a (pro $x > L$) popisuje hustota pravděpodobnosti prošlou vlnu s malou, ale konstantní amplitudou. To znamená, že elektron se v této oblasti může nacházet se stejnou relativně malou pravděpodobností kdekoli podél osy x , pokud se mu podaří protunelovat bariérou. (Srovnajte tuto část obrázku s obr. 39.12 pro volnou částici.)

Definujeme *koeficient průchodu* T pro dopadající vlnu a bariéru z obr. 39.13a, který určuje pravděpodobnost, že dopadající elektron projde bariérou, tedy pravděpodobnost, že se uskuteční tunelování. Například pro $T = 0,02$ z každých 1 000 elektronů vystřelených do bariéry jich průměrně 20 protuneluje a 980 se odrazí.

Koeficient průchodu T bariérou výšky E_{p0} je přibližně

$$T \approx e^{-2\kappa L}, \quad (39.21)$$

kde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(E_{p0} - E)}{\hbar^2}}. \quad (39.22)$$

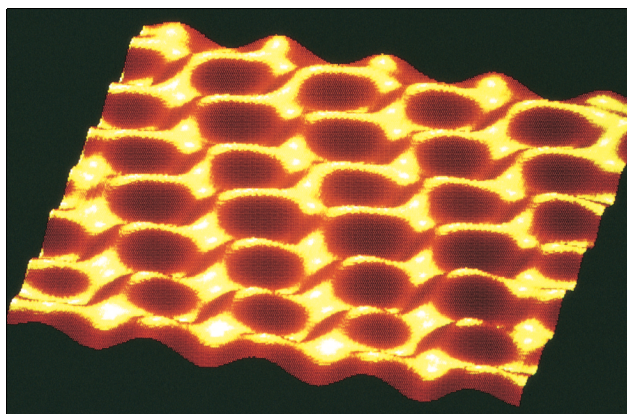
Závislost T v rov. (39.21) je exponenciální, a proto je T velice citlivá na hodnotu všech tří proměnných, na kterých závisí: na hmotnosti částice m , tloušťce bariéry L a rozdílu energie $E_{p0} - E$.

Tunelování má mnoho praktických aplikací, jako je například *tunelová dioda*, ve které můžeme rychle zapnout a vypnout proud tunelujících elektronů tím, že změníme výšku bariéry. Tuto změnu můžeme provádět velmi rychle (do 5 ps), a proto tunelovou diodu můžeme použít tam, kde vyžadujeme velmi rychlou odezvu. Nobelovu cenu za fyziku v roce 1973 dostali tři „tuneláři“, Leo Esaki za tunelování v polovodičích, Ivar Giaever za tunelování v supravodičích a Brian Josephson za objev *Josephsonova jevu* (rychlého kvantového přepínače založeného na tunelování). Nobelova cena za fyziku v roce 1986 byla udělena Gerdu Binnigovi a Heinrichu Rohrerovi za to, že vyvinuli další užitečné zařízení založené na tunelování, a to rastrovací tunelový mikroskop.

KONTROLA 5: Je vlnová délka prošlé vlny v obr. 39.13b větší, menší, nebo stejná jako vlnová délka dopadající vlny?

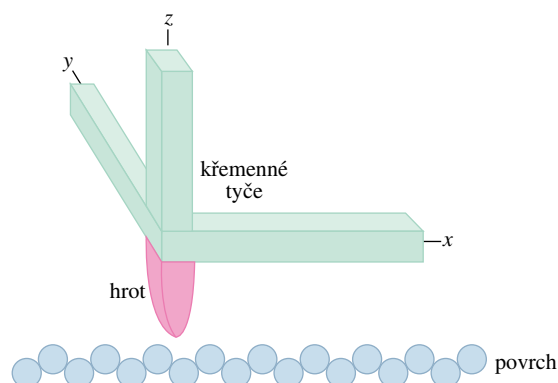
Rastrovací tunelový mikroskop (STM)

Na tunelování je založen rastrovací tunelový mikroskop STM (z angl. scanning tunneling microscope), který dovo-luje vytvářet podrobné zobrazení povrchů a ukázat detaily s atomovými rozměry, tedy s rozlišením mnohem lepším než u optického mikroskopu. Obr. 39.14 ukazuje jeden takový příklad, na kterém můžeme vidět jednotlivé atomy.



Obr. 39.14 Kontury povrchu grafitu zobrazené v rastrovacím tunelovém mikroskopu. Zřetelně vidíme atomy uhlíku tvořící šestiúhelníkovou strukturu.

Obr. 39.15 ukazuje princip rastrovacího tunelového mikroskopu. Ostrý kovový hrot, upevněný v průsečíku tří vzájemně kolmých křemenných tyčí, je umístěn do blízkosti



Obr. 39.15 Princip rastrovacího tunelového mikroskopu (STM). Tři křemenné tyče vedou ostrý vodivý hrot těsně nad studovaným povrchem tak, že při rastrování udržují konstantní vzdálenost mezi hrotem a povrchem. Hrot tedy sleduje konturu povrchu. Záznam jeho pohybu vytvoří zobrazení jako je obr. 39.14.

studovaného povrchu. Mezi hrotem a povrchem vzorku se udržuje malé napětí, někdy jen 10 mV.

Krystal křemene vykazuje zajímavou vlastnost zvanou *piezoelektrický jev*: vlivem elektrického napětí, přiloženého na křemenný krystal, se nepatrně změní jeho rozměry. Tato vlastnost se dá využít pro plynulou změnu délky každé ze tří tyčí z obr. 39.15 o velmi malé hodnoty, takže hrotem můžeme nejen rastrovat podél povrchu (ve směrech x a y), ale také jím můžeme pohybovat kolmo k povrchu vzorku ve směru z .

Vzdálenost mezi povrchem a hrotem vytváří bariéru potenciální energie podobně jako na obr. 39.13a. Je-li hrot dostatečně blízko u povrchu, elektrony ze vzorku mohou touto bariérou tunelovat do hrotu a vytvářet tak tunelový proud.

Při praktickém provozu se používá zpětná vazba pro nastavení svislé vzdálenosti hrotu tak, aby se při rastrování nad povrchem udržoval tunelový proud konstantní. To znamená, že i vzdálenost hrotu od vzorku zůstává při rastrování konstantní. Na výstupu — jako je obr. 39.14 — pak můžeme na monitoru zobrazit proměnnou svislou polohu hrotu a tedy obrys povrchu jako závislost na poloze hrotu v rovině xy .

Rastrovací tunelové mikroskopy se dají běžně zakoupit a používají se v řadě laboratoří.

PŘÍKLAD 39.7

Předpokládejme, že v obr. 39.13a máme elektron o celkové energii 5,1 eV dopadající na bariéru o výšce $E_{p0} = 6,8$ eV a šířce $L = 750$ pm.

(a) Jak je přibližně velký koeficient průchodu T pro tyto elektrony?

ŘEŠENÍ: Pro výpočet T z rov. (39.21) nejprve určíme z rov. (39.22)

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(E_{p0} - E)}{\hbar^2}}.$$

Čitatel zlomku pod odmocninou je

$$2(9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(6,8 \text{ eV} - 5,1 \text{ eV}) \cdot (1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV}) = 4,955 \cdot 10^{-49} \text{ J} \cdot \text{kg}.$$

Tedy

$$\kappa = \sqrt{\frac{(4,955 \cdot 10^{-49} \text{ J} \cdot \text{kg})}{(1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}} = 6,67 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}.$$

Bezrozměrová veličina $2\kappa L$ je potom

$$2\kappa L = 2(6,67 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1})(750 \cdot 10^{-12} \text{ m}) = 10,0$$

a z rov. (39.21) dostaneme koeficient propustnosti

$$T \approx e^{-2\kappa L} = e^{-10,0} = 45 \cdot 10^{-6}. \quad (\text{Odpověď})$$

Z každého milionu elektronů, které dopadnou na bariéru, jich přibližně 45 protuneluje.

(b) Jak velký by byl koeficient propustnosti pro protony?

ŘEŠENÍ: Zopakujeme-li tento výpočet znovu pro hmotnost protonu ($1,67 \cdot 10^{-27}$ kg) místo hmotnosti elektronu, dostaneme $T \approx 10^{-186}$. Koeficient průchodu se nesmírně snižuje pro hmotnější částice. Představte si, jak malý by pak musel být pro lentilky!

PŘEHLED & SHRNUÍ

Fotony

Při interakci světla s hmotou se energie a hybnost přenášejí v daném místě v diskrétních množstvích, „kvantech“ energie nazývaných **fotony**. Energie a hybnost fotonu jsou

$$E = hf \quad (\text{energie fotonu}), \quad (39.2)$$

$$p = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{hybnost fotonu}), \quad (39.7)$$

kde f a λ jsou frekvence a vlnová délka příslušné světelné vlny.

Fotoelektrický jev

Při dopadu světla o dostatečně vysoké frekvenci na čistý kovový povrch jsou emitovány elektrony v důsledku interakce fotonu s elektrony v kovu. Platí rovnice

$$hf = E_{k,\max} + \Phi, \quad (39.5)$$

kde hf je energie fotonu, $E_{k,\max}$ je maximální kinetická energie emitovaných elektronů a Φ je *výstupní práce* materiálu terče, tedy minimální energie, kterou musí elektron získat, aby mohl opustit povrch terče. Je-li hf menší než Φ , fotoelektrický jev nenastane.

Comptonův posuv

Při rozptylu rentgenového záření na volně vázaných elektronech v terči má část rozptýleného rentgenového záření delší vlnovou délku než záření dopadající. *Comptonův posuv* (změna vlnové délky) pro rozptyl rentgenového záření do úhlu φ je

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \varphi). \quad (39.11)$$

Světelné vlny a fotony

Při interakci světla s hmotou se energie a hybnost přenášejí

fotony. Při šíření světla však interpretujeme světelnou vlnu jako vlnu pravděpodobnosti, ve které je pravděpodobnost (za jednotku času), že foton bude detegován, úměrná E_m^2 , kde E_m je amplituda kmitajícího elektrického pole příslušné světelné vlny v místě detektoru.

Vlnové vlastnosti hmoty

Pohybující se částice, jako je elektron nebo proton, může být popsána jako de Broglieho vlna. Její vlnová délka, nazývaná de Broglieho vlnová délka, je rovna $\lambda = h/p$, kde p je hybnost částice.

Vlnová funkce

Šíření de Broglieho vlny je popsáno její vlnovou funkcí $\Psi(x, y, z, t)$, kterou zpravidla můžeme rozdělit na prostorově závislou část $\psi(x, y, z)$ a na časově závislou část $e^{-i\omega t}$. Pro částici o hmotnosti m pohybující se podél osy x s konstantní celkovou energií E v oblasti, kde je její potenciální energie $E_p(x)$, můžeme $\psi(x)$ nalézt řešením Schrödingerovy rovnice

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - E_p(x)]\psi = 0. \quad (39.15)$$

De Broglieho vlna je stejně jako světelná vlna vlnou pravděpodobnosti v tomto smyslu: když do této vlny vložíme detektor, je pravděpodobnost, že detektor zaregistruje částici v libovolně zvoleném časovém intervalu, úměrná hustotě pravděpodobnosti $|\psi|^2$.

Pro volnou částici, tedy pro částici, pro kterou je $E_p(x) = 0$, pohybující se v kladném (nebo záporném) směru osy x , má

$|\psi|^2$ konstantní hodnotu pro libovolnou polohu podél osy x .

Heisenbergův princip neurčitosti

Pravděpodobnostní podstata kvantové fyziky klade zásadní omezení na detekci polohy a hybnosti částice. Nemůžeme měřit polohu $\mathbf{r}$ a hybnost $\mathbf{p}$ částice současně s neomezenou přesností. Neurčitost složek těchto veličin je dána vztahy

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq \hbar, \\ \Delta y \Delta p_y &\geq \hbar, \\ \Delta z \Delta p_z &\geq \hbar. \end{aligned} \quad (39.20)$$

Tunelování

Podle klasické fyziky se dopadající částice s energií E vždy odrazí od bariéry potenciální energie o výšce $E_{p0} > E$. V kvantové fyzice má vlna pravděpodobnosti příslušná dané částici konečnou pravděpodobnost, že částice takovou bariérou protuneluje.

Pravděpodobnost, že daná částice o hmotnosti m a energii E protuneluje bariérou o výšce E_{p0} a tloušťce L , je určena koeficientem průchodu T

$$T \approx e^{-2\kappa L}, \quad (39.21)$$

kde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(E_{p0} - E)}{\hbar^2}}. \quad (39.22)$$

OTÁZKY

1. Mikrovlnná trouba i lékařský rentgen vytvářejí elektromagnetické vlny. Které z nich mají větší (a) vlnovou délku, (b) frekvenci a (c) energii fotonů?
2. Které z následujících tvrzení o fotoelektrickém jevu platí a které neplatí? (a) Čím větší je frekvence dopadajícího světla, tím větší je brzdný potenciál. (b) Čím větší je intenzita dopadajícího světla, tím větší je prahová frekvence. (c) Čím větší je výstupní práce materiálu terče, tím větší je brzdný potenciál. (d) Čím větší je výstupní práce materiálu terče, tím větší je prahová frekvence. (e) Čím větší je frekvence dopadajícího světla, tím větší je maximální kinetická energie emitovaných elektronů. (f) Čím větší je energie fotonů, tím menší je brzdný potenciál.
3. Určete z obrázku v kontrole 2, zda je pro danou frekvenci dopadajícího světla větší maximální kinetická energie emitovaných elektronů pro terč vyrobený ze sodíku, nebo z draslíku.
4. Která z následujících veličin u fotoelektrického jevu (pro daný terč a danou frekvenci dopadajícího světla), pokud vůbec nějaká, závisí na intenzitě dopadajícího světla: (a) maximální kinetická energie emitovaných elektronů, (b) maximální proud fotoelektronů, (c) brzdný potenciál, (d) prahová frekvence?
5. Svítíte-li ultrafialovým světlem na izolovanou kovovou destičku, destička po krátkou dobu emituje elektrony. Proč tato emise po nějaké době přestane?
6. Kovová destička je osvětlována světlem s danou frekvencí. Co určuje, zda jsou elektrony emitovány nebo ne: (a) intenzita světla, (b) délka doby osvětlení, (c) tepelná vodivost destičky, (d) plocha destičky, (e) materiál destičky?
7. V pokusu s Comptonovým posuvem je foton rozptýlen dopředu, takže podle obr. 39.3 je $\varphi = 0$. Jakou energii získá při rozptýlu elektron?
8. Podle vztahu (39.11) je Comptonův posuv stejný pro rentgenové záření i pro viditelné světlo. Proč můžeme snadno měřit Comptonův posuv pro rentgenové záření a nemůžeme jej měřit pro viditelné světlo?
9. Foton A má dvojnásobnou energii než foton B. (a) Je hybnost fotonu A menší, stejná, nebo větší než u fotonu B? (b) Je vlnová délka fotonu A menší, stejná, nebo větší než u fotonu B?
10. Porovnejte fotony z lékařského rentgenu (foton A) a z mikrovlnné trouby (foton B). Který má větší (a) vlnovou délku, (b) energii, (c) frekvenci, (d) hybnost?
11. Data z obr. 39.4 byla měřena na uhlíkovém terči. Jakým

zásadním způsobem by se výsledky lišily, kdyby terč byl ze síry místo z uhlíku?

12. Elektron a proton mají stejnou kinetickou energii. Který z nich má větší de Broglieho vlnovou délku?

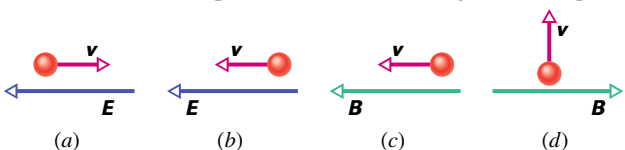
13. (a) Zdvojnásobíme-li kinetickou energii nerelativistické částice, jak se změní její de Broglieho vlnová délka? (b) Jak se změní vlnová délka, zdvojnásobíme-li rychlost částice?

14. Následující nerelativistické částice mají stejnou kinetickou energii. Seřadte je podle jejich de Broglieho vlnové délky od největší: elektron, α -částice, neutron.

15. Je de Broglieho vlnová délka vystřelené kulky velmi malá, nebo velmi velká?

16. Srovnajte Comptonovu vlnovou délku elektronu a jeho de Broglieho vlnovou délku. Která trzení platí? (a) Comptonova vlnová délka je vždy větší. (b) Comptonova vlnová délka je vždy menší. (c) Obě vlnové délky jsou vždy stejné. (d) Obě vlnové délky jsou navzájem nezávislé.

17. Obr. 39.16 ukazuje čtyři možné případy pohybu elektronu v poli. Pohybuje se (a) proti směru elektrického pole, (b) ve směru elektrického pole, (c) ve směru magnetického pole,



Obr. 39.16 Otázka 17

(d) kolmo ke směru magnetického pole. Určete pro každý případ, jestli se de Broglieho vlnová délka zvětšuje, zmenšuje, nebo zůstává stejná.

18. Proton a deuteron, každý o stejné kinetické energii 3 MeV, dopadají na bariéru o výšce $E_{p0} = 10$ MeV. Která částice má větší pravděpodobnost protunelovat bariérou? (Deuteron má dvakrát větší hmotnost než proton.)

19. Co má větší vliv na koeficient průchodu T potenciálovou bariérou: (a) zvětšení výšky bariéry E_{p0} o 1 %, nebo (b) snížení kinetické energie dopadajícího elektronu o 1 %?

20. Proč jsou minima hodnot pravděpodobnosti $|\psi|^2$ v levé části obr. 39.13b větší než nula?

21. Předpokládejte, že výška potenciálové bariéry na obr. 39.13a je nekonečná. (a) Jakou hodnotu má koeficient průchodu pro elektron přibližující se k bariéře? (b) Předpovídá rov. (39.21) očekávaný výsledek?

22. Tabulka popisuje tři případy při pokusu s tunelováním z obr. 39.13. Seřadte je sestupně podle pravděpodobnosti, že elektrony protunelují bariérou.

	ENERGIE ELEKTRONŮ	VÝŠKA BARIÉRY	TLOUŠTKA BARIÉRY
(a)	E	$5E$	L
(b)	E	$17E$	$L/2$
(c)	E	$2E$	$2L$

CVIČENÍ & ÚLOHY

ODST. 39.2 Světelné vlny a fotony

1C. Ukažte, že energie E fotonu v eV a jeho vlnová délka λ v nm jsou číselně svázány vztahem $E = 1240/\lambda$.

2C. Oranžové světlo dálniční výbojky má vlnovou délku 589 nm. Jaká je příslušná energie fotonů tohoto světla?

3C. Vyjádřete Planckovu konstantu v jednotkách eV·fs (elektronvolt-femtosekunda).

4C. Monochromatické světlo dopadá na fotografický film. Jednotlivý foton se zaznamená, pokud má energii alespoň 0,6 eV, aby disocioval molekulu AgBr ve filmu. Jaká je největší vlnová délka světla, kterou můžeme zaznamenat? V jaké oblasti spektra se tato hodnota nachází?

5C. Spektrální emisní čára, která je velmi důležitá v astronomii, má vlnovou délku 21 cm. Jaká je příslušná energie fotonu?

6C. Jak rychle se musí pohybovat elektrony, aby měly stejnou energii jako fotony sodíkového světla ($\lambda = 590$ nm)?

7C. S jakou četností emituje Slunce fotony? Pro jednoduchost předpokládejte, že světlo Slunce je monochromatické s $\lambda = 550$ nm. Slunce vyzařuje světlo s výkonem $3,9 \cdot 10^{26}$ W.

8C. Helium-neonový laser vyzařuje svazek červeného světla ($\lambda = 633$ nm) o průměru přibližně 3,5 mm. Je-li výkon laseru

5,0 mW, kolik fotonů dopadá na detektor v dráze svazku? Předpokládejte, že detektor absorbuje celý svazek.

9C. Donedávna byl metr definován jako 1 650 763,73 násobek vlnové délky oranžového světla emitovaného světelným zdrojem obsahujícím atomy kryptonu-86. Jaká je energie fotonu tohoto záření?

10Ú. Za ideálních podmínek vnímá lidské oko světlo o vlnové délce 550 nm, je-li četnost dopadajícího světla jen kolem 100 fotonů za sekundu. Jakému výkonu to odpovídá?

11Ú. Ultrafialová výbojka, vyzařující světlo o vlnové délce 400 nm, a infračervená žárovka, vyzařující světlo o vlnové délce 700 nm, mají obě výkon 400 W. (a) Který zdroj světla vytváří víc fotonů a (b) jaká je jejich četnost?

12Ú. Družice na dráze kolem Země používá solární panely o ploše $2,60$ m² kolmé na směr slunečních paprsků. Sluneční energie má intenzitu $1,39$ kW/m². (a) S jakou četností dopadají fotony ze Slunce na panel? (b) S jakou četností jsou fotony pohlcovány panelem? Předpokládejte, že sluneční světlo je monochromatické, má vlnovou délku 550 nm a všechno záření dopadající na panel se pohltí. (c) Za jak dlouho dopadne na panel jeden mol fotonů?

13Ú. Speciální zdroj vyzařuje monochromatické světlo o vlnové délce 630 nm. Jeho příkon je 60 W a účinnost převodu elektrické energie na světlo je 93 %. Kolik fotonů vyzaří zdroj za svou dobu života 730 h?

14Ú. Argonový laser ($\lambda = 515$ nm) o výkonu 1,5 W má průměr svazku $d = 3,0$ mm. Svazek je zaostřen systémem čoček s ohniskovou vzdáleností $f = 2,5$ mm. Zfokusevaný svazek dopadá na dokonale pohlcující stínítko, kde vytváří kruhový difrakční obrazec, jehož centrální kroužek má poloměr R daný vztahem $1,22f\lambda/d$. Lze dokázat, že 84 % dopadající energie je soustředěno v centrálním kroužku a zbytek světla je v soustředných difrakčních kroužcích, které obklopují tento kroužek. S jakou četností jsou fotony absorbovány stínítkem v centrálním kroužku difrakčního obrazce?

15Ú. Sodíková výbojka ($\lambda = 589$ nm) s výkonem 100 W vyzařuje rovnoměrně do všech směrů. (a) S jakou četností se ve výbojce vytvářejí fotony? (b) V jaké vzdálenosti od výbojky bude absorbuující stínítko přijímat fotony s četností 1,00 fotonu/(cm²·s)? (c) Jaký je tok fotonů (počet fotonů na jednotku plochy za jednotku času) na malém stínítku 2,00 m od výbojky?

ODST. 39.3 Fotoelektrický jev

16C. Výstupní práce draslíku a cesia jsou 2,25 eV a 2,14 eV. (a) Uskuteční se fotoelektrický jev pro některý z těchto prvků pro dopadající světlo o vlnové délce 565 nm? (b) Uskuteční se pro světlo o vlnové délce 518 nm?

17C. Hledáte látku pro fotočlánek, který bude pracovat na principu fotoelektrického jevu s viditelným světlem. Který materiál bude vyhovovat (výstupní práce je uvedena v závorce): tantal (4,2 eV), wolfram (4,5 eV), hliník (4,2 eV), baryum (2,5 eV), lithium (2,3 eV)?

18C. (a) Energie potřebná pro emisi elektronu z kovového sodíku je 2,28 eV. Vykazuje sodík fotoefekt pro červené světlo s $\lambda = 680$ nm? (b) Jaká je prahová vlnová délka pro emisi fotoelektronů ze sodíku? Jaké barvě světla odpovídá?

19C. Nalezněte nejvyšší kinetickou energii elektronů emitovaných z materiálu o výstupní práci 2,3 eV pro frekvenci dopadajícího záření $3,0 \cdot 10^{15}$ Hz.

20C. Světlo dopadá na povrch sodíku a způsobuje fotoemisi. Brzdný potenciál je pro emitované elektrony 5,0 V a výstupní práce sodíku je 2,2 eV. Jaká je vlnová délka dopadajícího světla?

21C. Výstupní práce wolframu je 4,50 eV. Spočítejte největší rychlost elektronů emitovaných při dopadu světla o energii 5,80 eV na povrch wolframu.

22Ú. Ultrafialové záření o vlnové délce 200 nm dopadá na povrch hliníku. Hliník má výstupní práci 4,2 eV. Jaká je kinetická energie (a) nejrychlejšího a (b) nejpomalejšího emitovaného elektronu? (c) Jaký je v tomto případě brzdý potenciál? (d) Jaká je prahová vlnová délka pro hliník?

23Ú. (a) Je-li výstupní práce daného kovu 1,8 eV, jaký je brzdý potenciál pro světlo o vlnové délce 400 nm? (b) Jaká je největší rychlost fotoelektronů při opuštění povrchu kovu?

24Ú. Vlnová délka světla příslušná prahové frekvenci je pro stříbro 325 nm. Najděte největší kinetickou energii elektronů emitovaných z povrchu stříbra ultrafialovým světlem o vlnové délce 254 nm.

25Ú. Družíce na oběžné dráze se může nabíjet v důsledku fotoefektu, protože světlo Slunce vyrazí elektrony z jejího vnějšího povrchu. Družíce se musí navrhovat tak, aby se toto nabíjení minimalizovalo. Předpokládejme, že povrch družice pokryjeme platinou, kovem o velmi vysoké výstupní práci ($\Phi = 5,32$ eV). Najděte nejdelší vlnovou délku dopadajícího slunečního světla, které může vyrazit elektrony z platiny.

26Ú. Brzdý potenciál pro elektrony emitované z povrchu ozářeného světlem o vlnové délce 491 nm je 0,710 V. Když změníme vlnovou délku na novou hodnotu, brzdý potenciál se změní na 1,43 V. (a) Jaká je tato nová vlnová délka? (b) Jaká je výstupní práce pro daný povrch?

27Ú. Při fotoelektrickém pokusu na sodíkovém povrchu najdeme brzdý potenciál 1,85 V pro vlnovou délku 300 nm a brzdý potenciál 0,820 V pro vlnovou délku 400 nm. Pomocí těchto hodnot určete (a) hodnotu Planckovy konstanty, (b) výstupní práci Φ pro sodík, (c) prahovou vlnovou délku λ_0 (vlnovou délku odpovídající prahové frekvenci) pro sodík.

28Ú. Kolem roku 1916 našel R. A. Millikan při fotoelektrickém pokusu na lithiu následující hodnoty pro brzdý potenciál:

Vlnová délka (nm)	433,9	404,7	365,0	312,5	253,5
Brzdý potenciál (V)	0,55	0,73	1,09	1,67	2,57

Z těchto dat vykreslete graf jako na obr. 39.2 (který je pro sodík) a použijte tento graf pro nalezení (a) Planckovy konstanty a (b) výstupní práce pro lithium.

29Ú. Předpokládejte, že relativní účinnost povrchu cesia (o výstupní práci 1,80 eV) je $1,0 \cdot 10^{-16}$; v průměru je tedy emitován jeden elektron na 10^{16} fotonů, které dopadají na povrch. Jaký změříte proud elektronů emitovaných tímto povrchem, když jej ozáříme laserem o vlnové délce 600 nm a výkonu 2,00 mW, pokud měříme všechny emitované elektrony?

30Ú. Rentgenové záření o vlnové délce 71 pm vyrazí ze zlaté fólie elektrony z vnitřních hladin atomů zlata. Emitované elektrony se pohybují po kruhových drahách o poloměru r v oblasti homogenního magnetického pole $\mathbf{B}$ tak, že hodnota součinu $Br = 1,88 \cdot 10^{-4}$ T·m. Určete (a) maximální kinetickou energii emitovaných elektronů a (b) práci potřebnou pro jejich emisi z atomů zlata.

ODST. 39.4 Fotony mají hybnost

31C. Rentgenové záření má vlnovou délku 35,0 pm. (a) Jaká je odpovídající frekvence záření? Určete příslušné hodnoty (b) energie fotonu a (c) hybnosti fotonu.

32C. (a) Jaká je hybnost fotonu, jehož energie se rovná kinetické energii elektronu? Jaká je (b) vlnová délka a (c) frekvence příslušného záření?

33C. Záření o vlnové délce 2,4 pm dopadá na terč obsahující volné elektrony. (a) Najděte vlnovou délku světla rozptýleného

do úhlu 30° vůči směru dopadajícího záření. (b) Opakujte pro úhel rozptylu 120° .

34Ú. Záření γ o energii fotonu $0,511 \text{ MeV}$ dopadá na volné elektrony v hliníkovém terči a rozptyluje se do různých směrů. (a) Jaká je vlnová délka dopadajícího záření γ ? (b) Jaká je vlnová délka paprsků rozptýlených do úhlu $90,0^\circ$ vůči dopadajícímu svazku? (c) Jaká je energie fotonů rozptýlených do tohoto směru?

35Ú. Analyzujte srážku mezi fotonem a volným elektronem a ukažte (při použití relativistické mechaniky), že není možné, aby foton předal celou svou energii volnému elektronu.

36Ú. Rentgenové záření o vlnové délce $0,01 \text{ nm}$ dopadá na terč obsahující volné elektrony. Uvažujte rentgenové záření rozptýlené do úhlu 180° . Určete (a) změnu vlnové délky rozptýleného rentgenového záření, (b) změnu energie fotonu v dopadajícím a rozptýleném svazku, (c) kinetickou energii předanou elektronu a (d) směr pohybu elektronu.

37Ú. Určete Comptonovu vlnovou délku (a) elektronu a (b) protonu. Jaká je energie fotonu, jehož vlnová délka je rovna Comptonově vlnové délce (c) elektronu a (d) protonu?

38Ú. Určete procentuální změnu energie fotonu při srážce jako na obr. 39.5 pro $\varphi = 90^\circ$ pro záření (a) v oblasti mikrovln $\lambda = 3,0 \text{ cm}$, (b) ve viditelném světle $\lambda = 500 \text{ nm}$, (c) pro rentgenové záření $\lambda = 25 \text{ pm}$ a (d) pro γ -záření o energii fotonu $1,0 \text{ MeV}$. (e) Jaké jsou možnosti detekce Comptonova posuvu v uvedených oblastech elektromagnetického spektra, použijeme-li jako základní kritérium ztrátu energie při jednotlivé srážce fotonu s elektronem?

39Ú. Jaká procentuální změna vlnové délky vede ke ztrátě 75 % energie fotonu při srážce fotonu s volným elektronem?

40Ú. Jaký je maximální posuv vlnové délky pro Comptonův rozptyl fotonu na volném protonu?

41Ú. Elektron o hmotnosti m a rychlosti v se čelně sráží s fotonem γ -záření o energii hf_0 a foton se odrazí proti původnímu směru dopadu. Dokažte, že energie odraženého fotonu, měřená v laboratorním systému, je

$$E = hf_0 \left(1 + \frac{2hf_0}{mc^2} \sqrt{\frac{1+v/c}{1-v/c}} \right)^{-1}.$$

42Ú. Jakou hodnotu bude mít (a) Comptonův posuv, (b) relativní hodnota Comptonova posuvu a (c) změna energie fotonu pro světlo o vlnové délce 590 nm při rozptylu na volném elektronu v klidu pro rozptyl do úhlu 90° vůči dopadajícímu svazku? (d) Spočítejte tytéž veličiny pro rentgenové záření s energií fotonu $50,0 \text{ keV}$.

43Ú. Uvažujte srážku mezi rentgenovým fotonem s počáteční energií $50,0 \text{ keV}$ a elektronem v klidu, při které se foton odrazil zpět a elektron dopředu. (a) Jaká je energie zpětně odraženého fotonu? (b) Jaká je kinetická energie elektronu?

44Ú. Ukažte, že relativní ztráta energie fotonu $\Delta E/E$ při srážce s částicí o hmotnosti m je dána vztahem

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{hf'}{mc^2} (1 - \cos \varphi),$$

kde E je energie dopadajícího fotonu, f' je frekvence rozptýleného fotonu a úhel φ je definován na obr. 39.5.

45Ú. Do jakého úhlu se musí rozptýlit foton o energii 200 keV na volném elektronu, aby ztratil 10 % své energie?

46Ú. Ukažte, že při rozptylu fotonu o energii E na volném elektronu je maximální kinetická energie předaná elektronu dána vztahem

$$E_{k,\max} = \frac{E^2}{E + mc^2/2}.$$

47Ú. Jaká je maximální kinetická energie elektronů vyražených z tenké měděné fólie dopadajícím svazkem rentgenového záření o energii $17,5 \text{ keV}$?

48Ú. Odvoďte rov. (39.11) pro Comptonův posuv z rov. (39.8), (39.9) a (39.10) vyloučením v a θ .

ODST. 39.6 Elektrony a de Broglieho vlny

49C. Projektil o hmotnosti 40 g má rychlost $1\,000 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. (a) Jakou vlnovou délku můžete projektilu přiřadit? (b) Proč nelze vlnový charakter projektilu demonstrovat pomocí difrakčních jevů?

50C. Použitím klasického vztahu mezi hybností a kinetickou energií ukažte, že de Broglieho vlnová délka elektronu (v nm) může být určena jako $\lambda = 1,226/\sqrt{E_k}$, kde E_k je kinetická energie elektronu v eV.

51C. V obvyklých televizních přístrojích jsou elektrony urychlovány napětím $25,0 \text{ kV}$. Jaká je vlnová délka těchto elektronů? (Nezapočítávejte relativistické jevy.)

52C. Určete vlnovou délku (a) $1,00 \text{ keV}$ elektronu, (b) $1,00 \text{ keV}$ fotonu a (c) $1,00 \text{ keV}$ neutronu.

53Ú. Vlnová délka žluté spektrální emisní čáry sodíku je 590 nm . Pro jakou kinetickou energii má elektron stejnou de Broglieho vlnovou délku?

54Ú. Elektron a foton mají každý vlnovou délku $0,20 \text{ nm}$. Určete (a) jejich hybnost a (b) jejich energii.

55Ú. Neutrony v tepelné rovnováze s látkou mají střední kinetickou energii $\frac{3}{2}kT$, kde k je Boltzmannova konstanta a T je teplota okolí, kterou bereme pro pokojovou teplotu jako 300 K . (a) Jaká je střední kinetická energie těchto neutronů? (b) Jaká je odpovídající de Broglieho vlnová délka?

56Ú. Je-li vlnová délka protonu 100 fm , (a) jaká je rychlost protonu a (b) jakým elektrickým potenciálem musíme proton urychlit, aby získal tuto rychlost?

57Ú. Uvažujte balon plněný plyným heliem při pokojové teplotě a atmosférickém tlaku. (a) Určete průměrnou de Broglieho vlnovou délku atomů helia a průměrnou vzdálenost mezi atomy helia za těchto podmínek. Střední kinetická energie atomu je rovna $\frac{3}{2}kT$, kde k je Boltzmannova konstanta. (b) Můžeme atomy považovat za těchto podmínek za částice?

58Ú. (a) Foton má energii $1,00 \text{ eV}$ a elektron má kinetickou energii o téže velikosti. Jaké jsou jejich vlnové délky? (b) Zopakujte výpočet i pro energii $1,00 \text{ GeV}$.

59Ú. (a) Foton a elektron mají stejné vlnové délky 1,00 nm. Určete energii fotonu a kinetickou energii elektronu. (b) Určete tyto hodnoty pro vlnovou délku 1,00 fm.

60Ú. Jedenkrát nabitý ionty sodíku jsou urychleny napětím 300 V. (a) Jakou hybnost získá takový iont? (b) Jakou má de Broglieho vlnovou délku?

61Ú. Velký elektronový urychlovač na Stanfordské univerzitě poskytuje elektrony s kinetickou energií 50 GeV. Elektrony s touto energií mají malou vlnovou délku, vhodnou pro studium jemných detailů jaderné struktury. Jaká je de Broglieho vlnová délka pro energii elektronu 50 GeV? Porovnejte tuto vlnovou délku s poloměrem typického jádra (kolem 5,0 fm). (Pro tuto energii stačí použít ultrarelativistický vztah mezi hybností a energií, a to $p = E/c$. To je stejný vztah, jaký používáme pro světlo, a platí pro kinetickou energii mnohem větší, než je klidová energie, což je v tomto případě splněno.)

62Ú. Existenci atomového jádra objevil v roce 1911 Ernest Rutherford, který správně interpretoval pokusy, při kterých se α -částice rozptylovaly na kovových fóliích z atomů jako je zlato. (a) Používané α -částice měly energii 7,5 MeV; jaká je jejich de Broglieho vlnová délka? (b) Měl být vlnový charakter dopadajících α -částic použit při interpretaci těchto pokusů? Hmotnost α -částic je 4,00 u (u je atomová hmotnostní jednotka) a nejkratší vzdálenost částic od jádra v těchto pokusech byla kolem 30 fm. (Vlnový charakter hmoty nebyl znám ještě nejméně deset let poté, kdy se tyto pokusy prováděly.)

63Ú. Nerelativistická částice se pohybuje třikrát rychleji než elektron. Podíl de Broglieho vlnové délky částice a vlnové délky elektronu je $1,813 \cdot 10^{-4}$. Určete hmotnost částice a tím i to, o jakou částici se jedná.

64Ú. Dosažitelná rozlišovací schopnost mikroskopu je dána pouze používanou vlnovou délkou; to znamená, že nejmenší detail, který můžeme rozlišit, má velikost přibližně rovnou vlnové délce. Předpokládejte, že chceme „vidět“ dovnitř atomu. Má-li atom průměr kolem 100 pm, znamená to, že musíme rozlišit detaily o vzdálenosti kolem 10 pm. (a) Použijeme-li elektronový mikroskop, jakou nejmenší energii elektronů potřebujeme? (b) Použijeme-li světelný mikroskop, jakou potřebujeme nejmenší energii fotonů? (c) Který mikroskop se dá prakticky lépe použít a proč?

65Ú. Jaké urychlovací napětí elektronů je třeba, aby elektronový mikroskop měl stejnou mezní rozlišovací schopnost, jakou můžeme získat pomocí γ -záření o energii 100 keV (úloha 64)?

ODST. 39.7 Schrödingerova rovnice

66C. (a) Mějme komplexní číslo $n = a + ib$, kde a a b jsou reálná (kladná nebo záporná) čísla. Ukažte, že součin nn^* je vždy kladné reálné číslo. (b) Mějme jiné komplexní číslo $m = c + id$. Ukažte, že $|nm| = |n| |m|$.

67C. Dosazením $\psi(x)$ a její druhé derivace do rov. (39.16) ukažte, že rov. (39.17) je řešením rov. (39.16).

68Ú. (a) Napište vlnovou funkci $\psi(x)$ v rov. (39.19) ve tvaru $\psi(x) = a + ib$, kde a a b jsou reálné veličiny. (Předpokládejte,

že ψ_0 je reálné.) (b) Určete časově závislou vlnovou funkci $\Psi(x, t)$, která odpovídá $\psi(x)$.

69Ú. Ukažte, že vlnové číslo k pro volnou částici o hmotnosti m může být určeno vztahem

$$k = \frac{\sqrt{2mE_k}}{\hbar},$$

kde E_k je kinetická energie částice.

70Ú. Funkce $\psi(x)$ z rov. (39.19) popisuje volnou částici, pro kterou ve Schrödingerově rovnici (39.15) předpokládáme, že $E_p(x) = 0$. Předpokládejte nyní, že $E_p(x) = E_{p0}$ je konstantní. Ukažte, že rov. (39.19) je stále řešením Schrödingerovy rovnice s vlnovým číslem k částice daným nyní vztahem

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - E_{p0})}.$$

71Ú. Ukažte, že $|\psi|^2 = |\Psi|^2$, kde ψ a Ψ jsou definovány v rov. (39.14). Dokažte tak, že hustota pravděpodobnosti nezávisí na čase.

72Ú. V rov. (39.17) položme $A = 0$ a označme B jako ψ_0 . Co potom výsledná vlnová funkce popisuje? Jak, pokud vůbec, se změní obr. 39.12?

73Ú. V rov. (39.18) ponecháme oba členy a položíme $A = B = \psi_0$. Rovnice pak popisuje superpozici dvou de Broglieho vln o stejné amplitudě, které se pohybují v opačných směrech. (Připomeňme si, že toto je podmínka pro vznik stojaté vlny.) (a) Ukažte, že $|\Psi(x, t)|^2$ je pak dáno vztahem

$$|\Psi(x, t)|^2 = 2\psi_0^2(1 + \cos 2kx).$$

(b) Vyneste tuto funkci do grafu a ukažte, že vyjadřuje čtverec amplitudy stojaté de Broglieho vlny. (c) Ukažte, že uzly této stojaté vlny se nacházejí v místech o souřadnicích

$$x = (2n + 1)(\frac{1}{4}\lambda), \quad \text{kde } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

a λ je de Broglieho vlnová délka částice. (d) Napište výraz pro nejpravděpodobnější polohy pro nalezení částice.

ODST. 39.8 Heisenbergův princip neurčitosti

74C. Obr. 39.12 ukazuje, že kvůli platnosti Heisenbergova principu neurčitosti nemůžeme určit souřadnici x polohy elektronu. Můžete určit souřadnici y a z ? (Tip: Hybnost elektronu nemá y a z složky.)

75C. Neurčitost polohy elektronu je dána jako 50 pm, což je zhruba rovno poloměru atomu vodíku. Jaká je nejmenší neurčitost při současném měření hybnosti tohoto elektronu?

76C. Představte si, že hrajete fotbal ve vesmíru (ne v našem!), kde má Planckova konstanta hodnotu 0,60 J·s. S jakou neurčitostí polohy by se pohyboval míč o hmotnosti 0,5 kg s rychlostí 20 m·s⁻¹, je-li neurčitost rychlosti 1,0 m·s⁻¹?

77C. Obr. 39.12 ukazuje případ, ve kterém je složka hybnosti p_x částice přesně určena, takže $\Delta p_x = 0$; potom podle Heisenbergova principu neurčitosti (rov. (39.20)) je poloha x částice zcela neznámá. Z téhož principu plyne, že také platí opačné tvrzení: je-li poloha částice přesně určena ($\Delta x = 0$), je neurčitost hybnosti nekonečně velká.

Uvažujte případ, kdy měříme polohu částice ne s absolutní přesností, ale s neurčitostí $\lambda/(2\pi)$, kde λ je de Broglieho vlnová délka částice. Ukažte, že neurčitost při současném měření hybnosti je rovna velikosti hybnosti, tedy že $\Delta p_x = p$. Bylo by za těchto okolností překvapivé, kdybyste naměřili nulovou hodnotu hybnosti? Jak by to bylo v případě, když změříte hybnost $0,5p$? A v případě $2p$? A co v případě, když změříte $12p$?

78Ú. V kap. 40 se dozvíte, že si už nepředstavujeme, že elektrony se pohybují po přesných drahách v atomu jako planety ve slunečním systému. Abychom to pochopili, pokusme se „pozorovat“ takovýto elektron ve světelném mikroskopu, ve kterém se snažíme změřit jeho předpokládanou polohu s přesností např. 10 pm (typický atom má poloměr kolem 100 pm). Vlnová délka světla použitá v mikroskopu musí být kolem 10 pm. (a) Jaká by musela být energie fotonu pro toto světlo? (b) Kolik energie by takový foton předal elektronu při čelní srážce? (c) Co nám tyto výsledky říkají o možnosti „pozorovat“ elektron v atomu ve dvou a více bodech podél jeho předpokládané dráhy? (Tip: Vnější elektrony jsou v atomu vázány s energií jen několika eV.)

ODST. 39.9 Tunelování

79Ú. Proton a deutron (má stejný náboj, ale dvojnásobnou hmotnost) dopadnou na bariéru o tloušťce 10 fm a výšce 10 MeV. Obě částice mají před dopadem kinetickou energii 3,0 MeV. (a) Jaký je koeficient průchodu každé z částic? (b) Jaké jsou jejich kinetické energie po průchodu bariérou, pokud bariérou projdou? (c) Jaké jsou jejich kinetické energie, když se na bariéře odrazí?

80Ú. Uvažujte bariéru potenciální energie jako na obr. 39.13a o výšce $E_{p0} = 6,0$ eV a tloušťce $L = 0,70$ nm. Jaká je energie dopadajícího elektronu, jehož pravděpodobnost průchodu je 0,001 0?

81Ú. (a) Uvažujte svazek protonů o energii 5,0 eV dopadajících na bariéru o výšce 6,0 eV a tloušťce 0,70 nm s četností odpovídající proudu 1 000 A. Jak dlouho musíte v průměru čekat, než jediný proton projde? (b) Jak dlouhá by byla tato doba pro elektrony místo protonů?

82Ú. Uvažujte tunelování bariérou z př. 39.7. O kolik procent se změní koeficient průchodu T , změní-li se o 1,0 % (a) výška bariéry, (b) tloušťka bariéry a (c) kinetická energie dopadajícího elektronu?

83Ú. Automobil o hmotnosti 1 500 kg se rychlostí $20 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ blíží ke kopci, který je 24 m vysoký a 30 m dlouhý. Jaká je

pravděpodobnost, že automobil protuneleuje kvantově mechanicky tímto kopcem a objeví se na druhé straně — neboli jaký je koeficient průchodu kopcem pro automobil? (Tip: Potenciální energie je v tomto případě dána gravitací.)

84Ú. Částice o hybnosti p dopadá na bariéru z obr. 39.13a zleva. V oblasti vlevo od bariéry je $E_p = 0$ a Schrödingerova rovnice má tvar (39.16). (a) Ukažte, že v této oblasti je funkce

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

řešením Schrödingerovy rovnice. A a B jsou libovolné reálné konstanty a $k = p/\hbar$. (b) Ukažte dále, že

$$|\psi|^2 = A^2 + B^2 + 2AB \cos 2kx.$$

(c) Ukažte, že $|\psi|^2$ osciluje mezi $(A+B)^2$ a $(A-B)^2$. Všimněte si, že pro $A \neq B$ je $|\psi|^2$ vždy kladné a nikdy nemá nulovou hodnotu. Porovnejte tyto výsledky s grafem $|\psi|^2$ z obr. 39.13b.

85Ú. Částice o energii E dopadá zleva na bariéru z obr. 39.13a. Uvnitř bariéry je $E < E_{p0}$. Ukažte, že v této oblasti má řešení Schrödingerovy rovnice tvar

$$\psi(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x},$$

kde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(E_{p0} - E)}{\hbar^2}}$$

a C a D jsou konstanty.

PROBLÉM

86. Schrödingerova rovnice a zákon zachování mechanické energie.

Uvažujme vlnovou funkci volné částice pohybující se v kladném směru osy x (rov. (39.19))

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t}, \quad \text{kde } \psi(x) = Ae^{ikx}.$$

(a) Zderivujte $\psi(x)$ podle x . (b) Vyjádřete z de Broglieho vztahu k pomocí hybnosti p a ukažte, že $p\psi = -i\hbar d\psi/dx$.

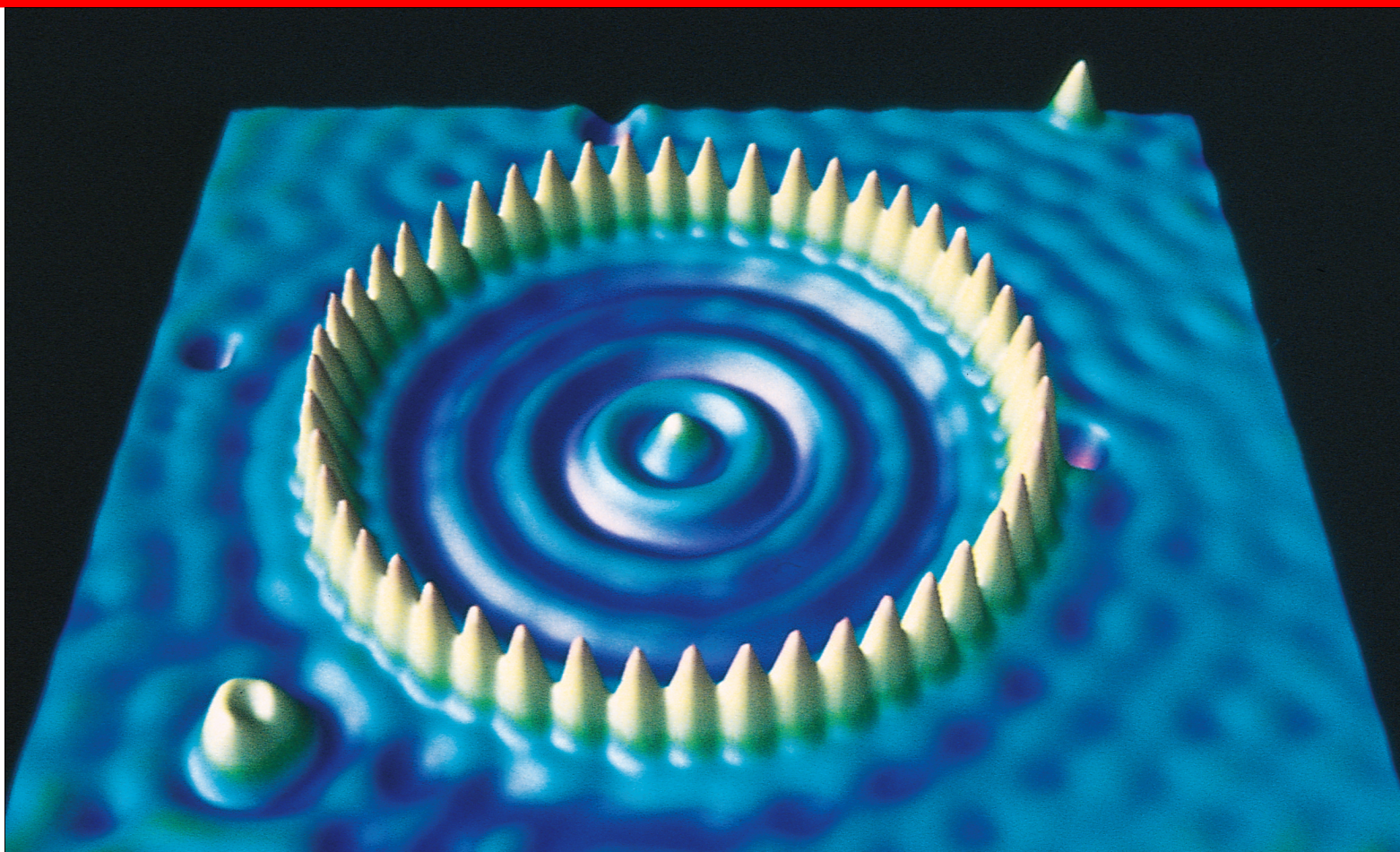
Zapišme zákon zachování mechanické energie jako $E = E_k + E_p$. Vynásobme tuto rovnici funkcí ψ :

$$E\psi = (E_k + E_p)\psi = \left[\frac{1}{2m} p \cdot p + E_p \right] \psi.$$

(c) Dosadte do této rovnice za p podle (b) příkaz k derivování $-i\hbar d/dx$ (jeho opakování povede ke druhé derivaci) a ukažte, že získaná diferenciální rovnice je ekvivalentní Schrödingerově rovnici (39.15).

40

Více o de Broglieho vlnách



*Tento pozoruhodný počítačový obraz byl pořízený v roce 1993 ve výzkumném středisku firmy IBM v Almadenu v Kalifornii. Každý ze 48 píků na obvodu kruhu představuje polohu jednotlivých atomů železa na speciálně připraveném povrchu tvořeném atomy mědi. Tento kruh o průměru přibližně 14 nm se nazývá **kvantová hradba**. Jak byly tyto atomy uspořádány do kruhu? Co znamenají vlnky viditelné uvnitř hradby?*

40.1 STAVBA ATOMU

Na počátku dvacátého století nikdo nevěděl, jak jsou uspořádány elektrony v atomech, jak se pohybují, jakými mechanismy atomy emitují a absorbují světlo a proč jsou přesto stabilní. Bez těchto znalostí nelze ale pochopit, jak a proč se atomy slučují a vytvářejí molekuly nebo jak se skládají při vzniku pevné látky. Proto také byly základy chemie — včetně biochemie, vysvětlující povahu samotného života — více či méně obestřeny tajemstvím.

V roce 1926 byly tyto a mnohé další otázky zodpovězeny v rámci vývoje kvantové fyziky a její základní části — **kvantové mechaniky**. K jejím hlavním předpokladům patří představa, že pohybující se elektrony, protony a ostatní částice lze nejlépe popsat pomocí de Broglieho vln, které splňují Schrödingerovu rovnici. Ačkoli kvantová teorie platí i pro velké objekty, nemá smysl popisovat chování fotbalových míčů, automobilů, planet a obdobných objektů pomocí kvantové mechaniky. Pro tyto velké, pomalu se pohybující objekty nám totiž newtonovská mechanika dá stejné odpovědi jako kvantová mechanika.

Dříve než použijeme kvantovou mechaniku k řešení problému atomové struktury, pokusíme se lépe pochopit její základní myšlenky na řešení několika jednodušších případů. Tyto „cvičné problémy“ mohou vypadat nepřirozeně, ale uvidíme, že nám poskytnou pevný základ k pochopení reálného problému struktury atomu vodíku, který budeme řešit v čl. 40.7.

40.2 VLNY NA STRUNÁCH A DE BROGLIEHO VLNY

V kap. 17 jsme viděli, že na napnuté struně můžeme vytvořit dva typy vln. Je-li struna dlouhá tak, že ji můžeme považovat za nekonečně dlouhou, můžeme na ní vytvořit *postupnou vlnu* v podstatě libovolné délky a tím i libovolné frekvence. Má-li napnutá struna jen konečnou délku, protože je upnutá na obou koncích, můžeme vytvořit pouze *stojaté vlny*; navíc tyto stojaté vlny mohou mít jenom jisté *diskrétní* frekvence. Jinak řečeno, omezení vlny na konečnou část prostoru vede ke *kvantování pohybu* — k existenci pouze *diskrétních stavů*, kdy každý z těchto jejích stavů je charakterizován ostře definovanou hodnotou frekvence.

Toto pozorování se týká vln všech druhů, včetně vln přiřazených částicím — *de Broglieho vln*. Pro ně je vhodnější pracovat s energií E částice než s frekvencí f vlny. V následujícím se soustředíme na de Broglieho vlnu pohybujícího se elektronu, který jsme si vybrali jako modelový objekt studia.

Uvažujme vlnu, přiřazenou elektronu pohybujícímu se ve směru osy x , na který nepůsobí žádná síla; jedná se tedy

o *volnou částici*. Energie takového elektronu může nabývat libovolné rozumné hodnoty stejně, jako vlna pohybující se na nekonečné struně může mít libovolnou rozumnou frekvenci.

Uvažujme dále de Broglieho vlnu přiřazenou elektronu v atomu, například některému z *valenčních* elektronů (ty jsou nejslaběji vázány) atomu sodíku. Takový elektron je přitahován ke kladně nabitému jádru coulombovskou silou a *není* volnou částicí. Může tedy existovat jen v některém z diskrétních stavů, které mají diskrétní hodnoty energie E . To je obdobné diskrétním stavům vlny na napnuté struně konečné délky s možnými kvantovanými hodnotami frekvencí. Pro de Broglieho vlny (stejně jako pro všechny ostatní druhy vln) můžeme vyslovit následující **omezovací princip**:

Prostorové omezení vlny vede ke kvantování, tj. k povolení jen vybraných diskrétních stavů s diskrétními hodnotami energie.

40.3 ZACHYCENÍ ELEKTRONU

Jednorozměrné pasti

Nyní prozkoumáme de Broglieho vlnu elektronu, který se nachází v omezené části prostoru. Využijeme přitom analogie se stojatou vlnou na struně konečné délky napnuté podél osy x a upevněné na obou koncích. Protože jsou konce pevné, stávají se oba krajní body uzly, tj. body, ve kterých je struna stále v klidu. Uzlů může samozřejmě na struně existovat víc, ale tyto dva jsou přítomny vždy, jak ukazuje obr. 17.17.

Stavy, tedy stojaté vlny, ve kterých struna může kmitat, jsou takové, pro které se na její délku L vejde celočíselný počet půlvln. To znamená, že struna se může nacházet jen ve stavech, pro které platí

$$L = \frac{n\lambda}{2} \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots \quad (40.1)$$

Každá hodnota n popisuje stav kmitající struny; použijeme-li jazyk kvantové mechaniky, řekneme, že n je *kvantové číslo*.

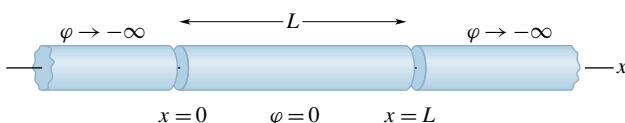
Pro každý stav struny, určený rov. (40.1), je příčná výchylka jejího elementu v různých bodech x rovna

$$y_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots, \quad (40.2)$$

kde kvantovým číslem n rozlišujeme jednotlivé vlastní kmity a amplituda A závisí na čase, ve kterém strunu sledujeme. (Rov. (40.2) je zkrácenou verzí rov. (17.51).) Vidíme,

že pro všechny hodnoty n existují body (uzly), v nichž je výchylka stále rovna nule; jsou to body $x = 0$ a $x = L$.

Nyní se vraťme k de Broglieho vlnám. Náš první problém bude přimět elektron, aby se pohyboval jen po jistém úseku osy x . (Stavy popisující elektron, jehož výskyt je prostorově omezen, nazýváme **vázané stavy**.) Na obr. 40.1 je znázorněna taková možná „elektronová past“. Skládá se ze dvou polonekonečných válců, z nichž každý má elektrický potenciál blízký se $-\infty$. Mezi nimi je umístěn dutý válec délky L , který má nulový potenciál. Abychom zachytili jeden elektron, umístíme jej do tohoto centrálního válce.



Obr. 40.1 Části idealizované „pasti“ určené k lokalizaci elektronu ve středním válci. Nekonečně dlouhé krajní válce jsou na velmi vysokém záporném potenciálu, střední válec je na potenciálu nulovém.

Past na obr. 40.1 je sice jednoduchá pro výpočty, ale nelze ji jednoduše vyrobit. Jednotlivý elektron však opravdu *můžeme* zachytit v pastích, které jsou sice složitější, ale pracují na podobném principu. Například na Washingtonské univerzitě byl jediný elektron v takové pasti vězněn po měsíce a bylo proto možné provést velmi přesná měření jeho vlastností.

Nalezení kvantované energie

Obr. 40.2 znázorňuje potenciální energii elektronu v závislosti na jeho poloze na ose x v idealizované elektronové pasti z obr. 40.1. Nachází-li se elektron v centrální části pasti, je jeho potenciální energie $E_p = -e\varphi$ nulová, poněvadž v této části je potenciál φ roven nule. Pokud by se elektron nacházel mimo tuto oblast, byla by jeho potenciální energie kladná a nekonečně velká, poněvadž zde je $\varphi \rightarrow -\infty$. Průběh potenciální energie z obr. 40.2 nazýváme **nekonečně hlubokou potenciálovou jámou** nebo zkráceně **nekonečnou potenciálovou jámou**. Mluvíme o „jámě“, protože elektron, umístěný ve středním válci na obr. 40.1, nemůže z této oblasti uniknout. Jakmile totiž elektron při svém pohybu narazí na konec válce, zapůsobí na něj v podstatě nekonečná síla, která ho obrátí zpět.

Stejně jako tomu bylo v případě stojaté vlny na napnuté struně, musí mít i vlna popisující tento uvězněný elektron v bodech $x = 0$ a $x = L$ uzly. Rov. (40.1) platí i pro tuto vlnu, interpretujeme-li λ v této rovnici jako de Broglieho vlnovou délku pohybujícího se elektronu.

De Broglieho vlnová délka λ je definována rov. (39.13) jako $\lambda = h/p$, kde p je velikost hybnosti elektronu; ta



Obr. 40.2 Elektrická potenciální energie $E_p(x)$ elektronu, který je „uvězněný“ ve středním válci ideální pasti z obr. 40.1. Vidíme, že $E_p = 0$ pro $0 < x < L$ a $E_p \rightarrow \infty$ pro $x < 0$ a $x > L$.

souvisí s kinetickou energií E_k vztahem $p = \sqrt{2mE_k}$, kde m je hmotnost elektronu.

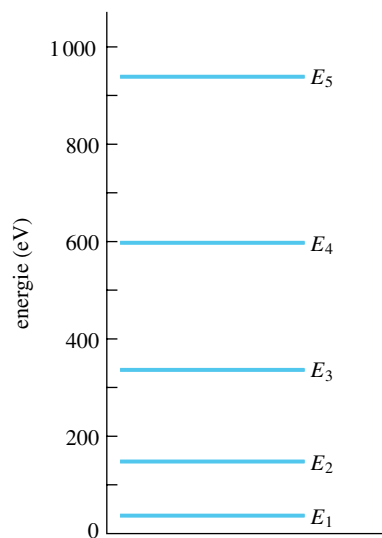
Celková energie E elektronu pohybujícího se ve středním válci, ve kterém je $E_p = 0$, je rovna jeho kinetické energii E_k . De Broglieho vlnovou délku takového elektronu můžeme tedy vyjádřit ve tvaru

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}. \quad (40.3)$$

Po dosazení rov. (40.3) do rov. (40.1) a vyjádření energie E dostaneme

$$E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2 \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots \quad (40.4)$$

Protože je elektron vázaný, může jeho energie nabývat pouze hodnot daných rov. (40.4). Číslo n určuje kvantový stav elektronu a nazývá se kvantové číslo. Na obr. 40.3



Obr. 40.3 Některé z dovolených energií daných rov. (40.4) pro elektron „uvězněný“ v nekonečně hluboké jámě z obr. 40.2 o šířce $L = 100$ pm. Tento graf se nazývá energiové spektrum.

jsou znázorněny některé diskrétní hodnoty energie (*energie hladiny*) elektronu, uvězněného v nekonečně hluboké potenciálové jámě s $L = 100 \text{ pm}$, vypočtené z rov. (40.4). (Takto zvolená hodnota L přibližně odpovídá rozměrům atomu.)

Kvantový stav vázaného elektronu s nejnižší možnou energií se nazývá **základní stav**; na obr. 40.3 je tímto stavem stav s energií E_1 . Kvantové stavy o vyšší energii se nazývají **excitované**. Na obr. 40.3 energie E_2 odpovídá prvnímu excitovanému stavu, stav s energií E_3 je druhý excitovaný stav atd.

Změny energie

Nejnižší energii má elektron v základním stavu; pokud v něm není, snaží se do něj přejít. Do excitovaného stavu (ve kterém má energii vyšší) se může dostat pouze tehdy, dodá-li mu vnější zdroj energii rovnou rozdílu energií základního a excitovaného stavu. O elektronu, který získá takovéto množství energie, říkáme, že učinil *kvantový skok* (nebo též *přechod*) do excitovaného stavu.

Jednou z možností, jak může elektron získat energii potřebnou ke kvantovému skoku na vyšší energiovou hladinu, je absorpce (neboli pohlcení) fotonu. Tato absorpce a kvantový přechod mohou nastat pouze za této podmínky:

Vázaný elektron může absorbovat jen takový foton, jehož energie hf se rovná rozdílu energií elektronu v počátečním a v koncovém stavu (s vyšší energií).

Elektron v excitovaném stavu dlouho nevydrží, ale rychle *deexcituje*, tj. přejde do stavu s nižší energií. Může např. emitovat neboli vyžářit foton, a to za následující podmínky:

Vázaný elektron může vyžářit jen takový foton, jehož energie hf se rovná rozdílu energie elektronu v počátečním a koncovém stavu (s nižší energií).

PŘÍKLAD 40.1

Elektron je vázán v nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce $L = 100 \text{ pm}$.

(a) Jaký je energiový rozdíl mezi sousedními hladinami s kvantovými čísly n a $n + 1$? Jaký je tento rozdíl pro $n = 1$?

ŘEŠENÍ: Z rov. (40.4) obdržíme

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{n+1} - E_n = \\ &= \frac{h^2}{8mL^2} ((n+1)^2 - n^2) = \\ &= \frac{h^2}{8mL^2} (2n+1) = \\ &= \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{8(9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(100 \cdot 10^{-12} \text{ m})^2} (2n+1) = \\ &= (6,03 \cdot 10^{-18} \text{ J}) \frac{(1 \text{ eV})}{(1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J})} (2n+1) = \\ &= (37,7 \text{ eV})(2n+1). \quad (\text{Odpověď})\end{aligned}$$

Energiový rozdíl mezi dvěma sousedními hladinami v tomto případě roste se zvětšujícím se kvantovým číslem.

Po dosazení za $n = 1$ do předchozí rovnice vyjde energiový rozdíl mezi kvantovými stavy s $n = 1$ a s $n = 2$ roven

$$\Delta E = (37,7 \text{ eV})(3) = 113 \text{ eV}, \quad (\text{Odpověď})$$

což je v souladu s obr. 40.3.

(b) Jaký je energiový rozdíl mezi sousedními energiovými hladinami elektronu vázaného v evakuované trubici o délce $L = 3,0 \text{ m}$?

ŘEŠENÍ: Postupujeme úplně stejně jako v případě (a), pouze místo $L = 100 \text{ pm}$ dosadíme hodnotu $L = 3,0 \text{ m}$. Výsledek je pak

$$\Delta E = (4,19 \cdot 10^{-20} \text{ eV})(2n+1). \quad (\text{Odpověď})$$

Pro hodnotu $n = 1$ obdržíme $\Delta E = 1,3 \cdot 10^{-19} \text{ eV}$. Tato hodnota je tak malá, že nemáme žádnou možnost, jak ji změřit. Je přibližně rovna energii, kterou by vyžadovalo posunutí elektronu o dva nanometry nahoru v gravitačním poli Země. Je-li elektron „uvězněn“ v tak velké části prostoru, jsou hladiny energií jeho dovolených stavů tak blízko u sebe, že nemohou být experimentálně odlišeny jako stavy diskrétní. V tomto případě nemůžeme kvantování energie a existenci diskrétních stavů zjistit.

PŘÍKLAD 40.2

Elektron je v počátečním stavu $n_i = 3$ v nekonečně hluboké potenciálové jámě šířky $L = 100 \text{ pm}$. Jakou energii hf a vlnovou délku λ musí mít foton, aby jeho pohlcením přešel elektron do stavu $n_f = 6$?

ŘEŠENÍ: Elektron má přejít z kvantového stavu s energií E_3 a kvantovým číslem $n_i = 3$ na energiovou hladinu E_6 s kvantovým číslem $n_f = 6$; k tomu mu musíme dodat energii,

např. absorpcí fotonu. Z rov. (40.4) vyplývá, že změna jeho energie ΔE je:

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_6 - E_3 = \frac{h^2}{8mL^2}n_6^2 - \frac{h^2}{8mL^2}n_3^2 = \\ &= \frac{h^2}{8mL^2}(n_6^2 - n_3^2). \quad (\text{Odpověď})\end{aligned}$$

Z rovnosti $hf = \Delta E$ dostaneme se zadanými hodnotami

$$\begin{aligned}hf &= \frac{h^2}{8mL^2}(n_6^2 - n_3^2) = \\ &= \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{8(9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(100 \cdot 10^{-12} \text{ m})^2}(6^2 - 3^2) = \\ &= 1,628 \cdot 10^{-16} \text{ J} \doteq 1,63 \cdot 10^{-16} \text{ J}, \quad (\text{Odpověď})\end{aligned}$$

to je asi 1 keV. Vlnovou délku λ určíme dosazením $f = c/\lambda$. Tím dostaneme

$$h \frac{c}{\lambda} = 1,628 \cdot 10^{-16} \text{ J}$$

a po úpravě a dosazení

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1})}{(1,628 \cdot 10^{-16} \text{ J})} = \\ &= 1,22 \cdot 10^{-9} \text{ m}. \quad (\text{Odpověď})\end{aligned}$$

Tato vlnová délka spadá do intervalu vlnových délek rentgenového záření.

KONTROLA 1: Seřadte následující dvojice kvantových stavů elektronu uvězněného v nekonečně hluboké potenciálové jámě sestupně podle velikosti rozdílu odpovídajících energií: (a) $n = 3$ a $n = 1$, (b) $n = 5$ a $n = 4$, (c) $n = 4$ a $n = 3$.

Nalezení vlnových funkcí

Řešíme-li Schrödingerovu rovnici pro elektron zachycený v nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce L , zjistíme, že jeho vlnová funkce má tvar:

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots \quad (40.6)$$

pro hodnoty x z intervalu $0 \leq x \leq L$, mimo tento interval je ψ rovno nule. V rov. (40.6) je A zatím libovolná konstanta; zanedlouho uvidíme, jak ji lze určit.

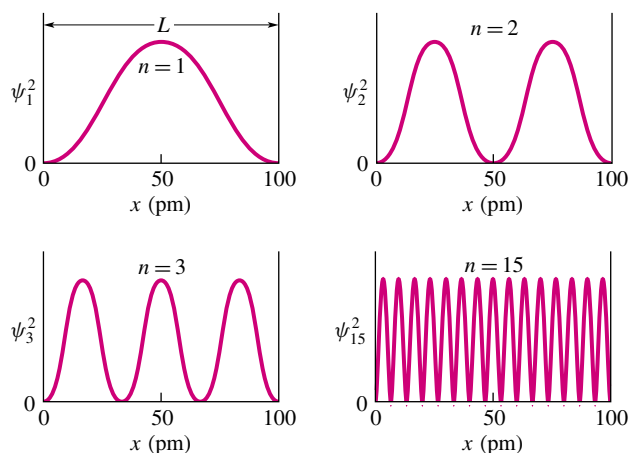
Současně nalezneme, že těmto stavům odpovídají energie dané rov. (40.4), kterou jsme odvodili na základě analogie se stojatou vlnou na napnuté struně. Vlnové funkce $\psi_n(x)$ mají stejný tvar jako funkce popisující výchylku

$y_n(x)$ stojaté vlny na struně upevněné na obou koncích (rov. (40.2)).

Více než $\psi_n(x)$ nás ovšem zajímá *hustota pravděpodobnosti* $\psi_n^2(x)$, protože tato veličina má fyzikální smysl. (Ačkoli vlnové funkce jsou obecně komplexní, v rov. (40.6) je vlnová funkce reálná, takže se nemusíme znepokojovat stanovením její absolutní hodnoty před umocněním.) Připomeňme si čl. 39.7, podle něhož $\psi_n^2(x)$ v každém bodě x udává pravděpodobnost, že se elektron nachází v okolí tohoto bodu. Přesněji řečeno pravděpodobnost, že se elektron bude nacházet mezi body x a $x + dx$ v nekonečně hluboké potenciálové jámě, je rovna $\psi_n^2(x) dx$. Výraz $\psi_n^2(x)$ je tedy pravděpodobnost vztahovaná na jednotku délky. Z rov. (40.6) vidíme, že pro elektron v nekonečně hluboké potenciálové jámě je rovna

$$\psi_n^2(x) = A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots, \quad (40.7)$$

pro interval $0 \leq x \leq L$. Mimo tento interval je hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu nulová. Na obr. 40.4 je znázorněna $\psi_n^2(x)$ pro $n = 1, 2, 3$ a 15 pro elektron v nekonečně hluboké jámě šířky $L = 100$ pm.



Obr. 40.4 Hustota pravděpodobnosti $\psi_n^2(x)$ pro čtyři stavy elektronu uvězněného v nekonečně hluboké potenciálové jámě; jejich kvantová čísla jsou: $n = 1, 2, 3$ a 15 . Elektron se bude s největší pravděpodobností nacházet v místech, kde hodnota funkce $\psi_n^2(x)$ je vysoká a s nejmenší pravděpodobností v místech, kde je tato hodnota malá.

Pokud by platila klasická fyzika, očekávali bychom, že uvězněný elektron bude detegován se stejnou pravděpodobností kdekoli v jámě. Na obr. 40.4 vidíme, že tomu tak není. Jeho podrobnější studium nebo rov. (40.7) ukazují, že ve stavu s $n = 2$ se elektron nachází s největší pravděpodobností kolem bodů $x = 25$ pm a $x = 75$ pm. Na

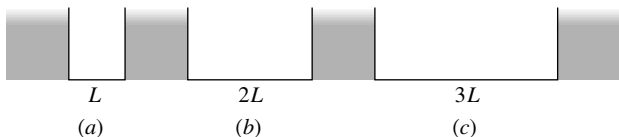
opak, elektron se téměř jistě nenachází kolem bodů $x = 0$, $x = 50 \text{ pm}$ a $x = 100 \text{ pm}$.

Hustota pravděpodobnosti pro případ $n = 15$ uvedená na obr. 40.4 však naznačuje, že pro n rostoucí se zvyšuje pravděpodobnost, že elektron najdeme se stejnou pravděpodobností kdekoli v jámě. Tento výsledek je projevem obecného principu, nazývaného **princip korespondence**:

Pro dostatečně velké hodnoty kvantových čísel se kvantové výsledky blíží výsledkům určeným pomocí klasické mechaniky.

Tento princip poprvé zformuloval dánský fyzik Niels Bohr a platí pro všechny předpovědi kvantové fyziky. Jistě nám připomene podobný princip z teorie relativity — pro dostatečně nízké rychlosti se výsledky speciální teorie relativity blíží výsledkům klasické mechaniky.

KONTROLA 2: Na obrázku jsou tři nekonečně hluboké potenciálové jámy se šířkami L , $2L$ a $3L$; každá obsahuje elektron ve stavu s $n = 10$. Seřadte jednotlivé jámy sestupně podle (a) počtu maxim v hustotě pravděpodobnosti výskytu elektronu, (b) hodnoty energie elektronu.



Normování

Součin $\psi_n^2(x) dx$ udává pravděpodobnost, že se elektron v nekonečně hluboké jámě bude nacházet na ose x mezi body x a $x + dx$. Víme, že elektron někde v jámě být musí, takže musí platit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2(x) dx = 1 \quad (\text{normovací rovnice}), \quad (40.8)$$

neboť jistotě odpovídá pravděpodobnost rovná jedné. Ačkoli meze integrálu zahrnují celou osu x , přispívá k výpočtu pravděpodobnosti pouze oblast od $x = 0$ do $x = L$. Graficky představuje integrál v rov. (40.8) plochu pod každou z křivek na obr. 40.4.

Při řešení př. 40.3 uvidíme, že po dosazení rov. (40.7) do rov. (40.8) lze přiřadit dosud libovolné konstantě A , která se v rov. (40.7) objevuje, hodnotu $A = \sqrt{2/L}$. Tomuto způsobu výpočtu amplitudy vlnové funkce pomocí normovací podmínky rov. (40.8) se říká **normování** vlnové funkce a týká se všech jednorozměrných vlnových funkcí.

Energie základního stavu

V nekonečně hluboké jámě určuje kvantové číslo $n = 1$ v rov. (40.4) stav elektronu s nejnižší energií. Tento stav se nazývá základní. V něm se bude vázaný elektron nacházet do té doby, dokud mu nebude dodána energie, která by mu umožnila přejít do stavu excitovaného.

Proč nemůžeme zahrnout do výčtu možných n v rovnici (40.4) i možnost $n = 0$? Dosazení za $n = 0$ do této rovnice by opravdu vedlo k nulové hodnotě energie základního stavu. Avšak z rov. (40.7) je vidět, že by platilo $\psi_n^2(x) dx = 0$ pro všechna x , což bychom mohli interpretovat pouze tak, že v potenciálové jámě žádný elektron není. Protože však elektron v jámě je, nevyhovuje $n = 0$ jako kvantové číslo.

To je velmi důležitý výsledek kvantové mechaniky: vázané systémy nemohou existovat ve stavech s nulovou energií. Mají vždy určitou minimální nenulovou energii nazývanou **energie základního stavu**.

Hodnotu této energie můžeme podle rov. (40.4) libovolně zmenšovat tím, že zvětšíme hodnotu L pro $n = 1$. V limitě $L \rightarrow \infty$ se energie základního stavu E_1 blíží opravdu k nule. Pak se ale nekonečně hluboká jáma stává rovněž nekonečně širokou, takže elektron se stává volnou částicí. A poněvadž energie volné částice není kvantována, může nabývat libovolných hodnot, včetně hodnoty nulové. Pouze vázaná částice musí mít energii základního stavu různou od nuly a nemůže být nikdy „v klidu“.

KONTROLA 3: Každá z následujících částic je vázána v nekonečně hluboké jámě: (a) elektron, (b) proton, (c) deuteron a (d) α -částice. Seřadte sestupně hodnoty jejich energií základního stavu.

PŘÍKLAD 40.3

Použijte rov. (40.8) k určení normovací konstanty A ve vlnové funkci z rovnice (40.6) pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu mezi $x = 0$ a $x = L$.

ŘEŠENÍ: Dosazením rov. (40.7) do rov. (40.8) a po vytknutí konstanty A před integrál obdržíme

$$A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1. \quad (40.9)$$

Změnili jsme meze integrálu z hodnot $-\infty$ a $+\infty$ na hodnoty 0 a L , poněvadž vlnová funkce nabývá nulových hodnot mimo interval těchto nových integračních mezí (takže není nutno integrovat mimo tyto meze).

Rovnici můžeme dále zjednodušit tím, že přejdeme od proměnné x k bezrozměrové proměnné y vztahem

$$y = \left(\frac{n\pi}{L}\right)x, \quad (40.10)$$

odkud

$$dx = \left(\frac{L}{n\pi}\right) dy.$$

Transformujeme-li proměnnou, musíme rovněž změnit integrační meze. Rov. (40.10) nám říká, že pro $x = 0$ je $y = 0$ a pro $x = L$ je $y = n\pi$. Nové hodnoty integračních mezí jsou tedy 0 a $n\pi$. Po všech těchto substitucích vypadá rov. (40.9) takto:

$$A^2 \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2 y \, dy = 1.$$

Po integraci dostaneme

$$\frac{A^2 L}{n\pi} \left[\frac{y}{2} - \frac{\sin 2y}{4} \right]_0^{n\pi} = 1.$$

Dosažením za integrační meze pak obdržíme

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

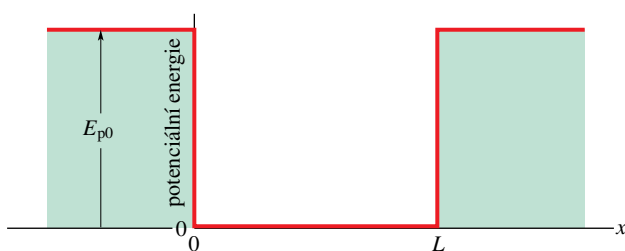
odkud

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}. \quad (\text{Odpověď}) \quad (40.11)$$

Tento výsledek nám říká, že A^2 , a tedy i $\psi_n^2(x)$, má rozměr převrácené délky. To souhlasí s tím, že hustota pravděpodobnosti je pravděpodobnost *vztažená na jednotku délky*. (Všimněte si, že v tomto případě normovací konstanta nezávisí na n .)

40.4 ELEKTRON V JÁMĚ KONEČNÉ HLOUBKY

Nekonečně hluboká potenciálová jáma je jednoduchá, ale nereálná. Realističtější jáma je znázorněna na obr. 40.5; potenciální energie elektronu mimo oblast jámy není již nekonečně velká, ale nabývá konečné kladné hodnoty E_{p0} , nazývané **hloubka jámy**. Jednoduchá analogie mezi vlami na napnuté struně a de Broglieho vlnami v případě takové jámy selhává, neboť si již nemůžeme být jisti tím, že se v bodech $x = 0$ a $x = L$ nacházejí uzly. (A jak v dalším uvidíme, také tam nejsou.)

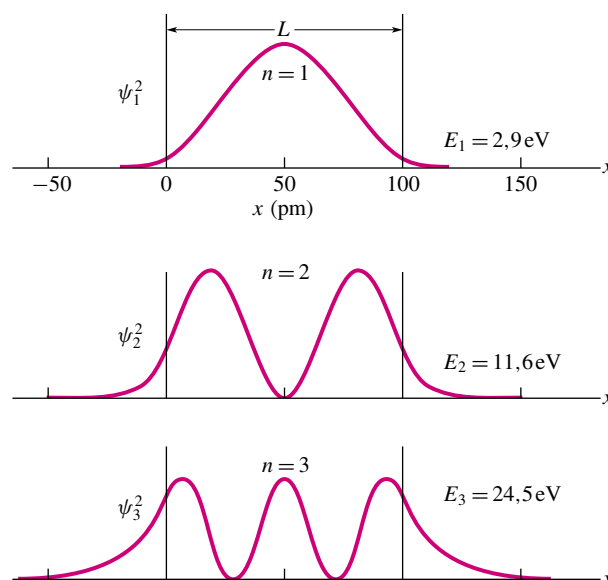


Obr. 40.5 Jáma *konečné* hloubky. Hloubka jámy je E_{p0} a její šířka je L . Podobně jako v případě nekonečně hluboké jámy na obr. 40.2 se elektron pohybuje jen podél osy x .

Abychom našli vlnové funkce popisující stavy elektronu v potenciálové jámě konečné hloubky z obr. 40.5 a příslušné hodnoty energie, musíme sáhnout k základní rovnici kvantové mechaniky — Schrödingerově rovnici. Z čl. 39.7 víme, že pro pohyb v jednom rozměru můžeme Schrödingerovu rovnici napsat ve tvaru (39.15):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - E_p(x)]\psi = 0. \quad (40.12)$$

Nebudeme se pouštět do řešení této rovnice, pouze si zde uvedeme řešení pro určité číselné hodnoty E_{p0} a L . V obr. 40.6 jsou vyneseny hodnoty $\psi_n^2(x)$ (hustoty pravděpodobnosti) pro $E_{p0} = 30 \text{ eV}$ a $L = 100 \text{ pm}$.



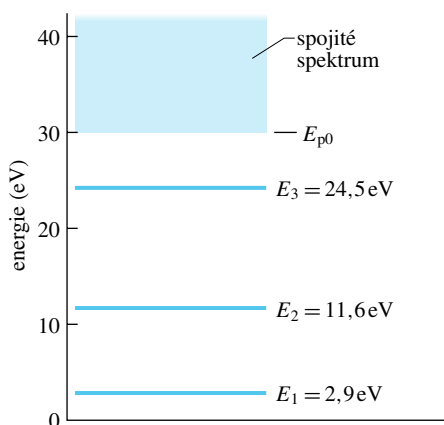
Obr. 40.6 Hustoty pravděpodobnosti $\psi_n^2(x)$ výskytu elektronu uvězněného v potenciálové jámě konečné hloubky z obr. 40.5 pro stavy s $n = 1, 2$ a 3 . Hloubka jámy je $E_{p0} = 30 \text{ eV}$ a její šířka je $L = 100 \text{ pm}$. Jiné vázané stavy pro elektron v této jámě neexistují.

Hustota pravděpodobnosti $\psi_n^2(x)$ pro každou funkci z obr. 40.6 splňuje normovací podmínku (40.8). To znamená, že plochy pod všemi třemi křivkami jsou rovny jedné.

Porovnáním obr. 40.6 (jáma konečné hloubky) s obrázkem 40.4 (nekonečně hluboká jáma) uvidíme jeden nápadný rozdíl: v případě jámy konečné hloubky existuje nenulová pravděpodobnost, že de Broglieho vlna elektronu může proniknout stěnami jámy i do oblasti, ve které se podle newtonovské mechaniky vyskytovat nemůže. Tato možnost by ale neměla být tak překvapivá, protože jsme v čl. 39.9 viděli, že elektron může tunelovat potenciálovou

bariérrou. „Prosakování“ stěnami jámy konečné hloubky je jevem podobným.

I když to není z obr. 40.6 zřejmé, existují jenom tři stavy s hodnotami energie menšími, než je hloubka jámy — v našem konkrétním případě se jedná o 30 eV. Elektrony s energií $E > 30$ eV nejsou vázány a jejich energie nejsou kvantované. Na obr. 40.7 jsou znázorněny energiové hladiny elektronu zachyceného v jámě.



Obr. 40.7 Energiové spektrum elektronu vázaného v jámě konečné hloubky 30 eV a šířky 100 pm. Má-li elektron energii menší než 30 eV, může se nacházet pouze v jednom ze tří diskretních stavů. Stavy s energiemi $E > 30$ eV nejsou kvantované, tvoří spojitou část spektra.

V nekonečně hluboké jámě bylo nekonečně mnoho diskretních stavů. V jámě konečné hloubky je diskretních stavů konečný počet, a to tím menší, čím je jáma mělkší. Ve velmi mělké jámě dokonce nemusí existovat ani jeden vázaný stav.

PŘÍKLAD 40.4

Předpokládejme, že v konečně hluboké jámě s $E_{p0} = 30$ eV a $L = 100$ pm je uvězněn elektron v základním stavu.

(a) Elektron se může dostat do vyššího vázaného stavu, ozáříme-li jámu světlem odpovídající vlnové délky. Jakou vlnovou délku musí mít světlo, aby ho elektron absorboval? V jaké oblasti spektra budou ležet tyto vlnové délky (nazývané absorpční spektrální čáry)?

ŘEŠENÍ: Energie předaná elektronu dopadajícím světlem může nabudit elektron z jeho základního stavu $n = 1$ do stavu s $n = 2$, případně $n = 3$. Jiné diskretní stavy nejsou v této jámě možné. Rozdíl energií (v případě menšího z obou energiových skoků) je $\Delta E = E_2 - E_1$. Tento rozdíl musí být roven energii, kterou elektron získá absorpcí fotonu, tj. energii $hf = hc/\lambda$. Porovnáme-li oba výrazy, obdržíme rovnici

$$E_2 - E_1 = \frac{hc}{\lambda}.$$

Vyjádříme-li odtud λ a dosadíme-li za hodnoty energií z obr. 40.7, získáme

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{hc}{E_2 - E_1} = \\ &= \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1})}{(11,6 \text{ eV} - 2,9 \text{ eV})(1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV})} \\ &= 1,43 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 143 \text{ nm.} \quad (\text{Odpověď})\end{aligned}$$

Tato vlnová délka se nachází v ultrafialové oblasti spektra.

Přechod ze základního stavu elektronu do stavu s $n = 3$ vyžaduje získat energii

$$\Delta E = E_3 - E_1 = 24,5 \text{ eV} - 2,9 \text{ eV} = 21,6 \text{ eV}.$$

Podobně jako dříve dostaneme

$$\lambda = 57,6 \text{ nm}, \quad (\text{Odpověď})$$

což odpovídá opět ultrafialové oblasti spektra.

Pokud je elektron podle předpokladu na počátku v základním stavu, neobjeví se žádné jiné diskretní spektrální čáry, protože podle obr. 40.7 se elektron v této jámě může nacházet jen v některém z uvedených tří stavů.

(b) Může elektron v základním stavu absorbovat foton o vlnové délce $\lambda = 100$ nm?

ŘEŠENÍ: Tato vlnová délka leží mezi vlnovou délkou 143 nm (potřebnou ke skoku na hladinu odpovídající prvnímu excitovanému stavu) a vlnovou délkou 57,6 nm (potřebnou pro druhý excitovaný stav). Absorpce fotonu o vlnové délce 100 nm by vynesla elektron kamsi mezi první a druhou hladinu, ale tam žádný stav není! Proto elektron nemůže absorbovat foton o této vlnové délce (ani žádné jiné z intervalu mezi 57,6 nm a 143 nm).

(c) Jakou vlnovou délku musí mít foton, aby se jeho pohlcením elektron v základním stavu stal volným elektronem?

ŘEŠENÍ: Aby se elektron, původně vázaný v potenciálové jámě, stal volným, musí přejít do spojité oblasti spektra na obr. 40.7. Musí tedy mít alespoň energii $E_{p0} = 30$ eV. Podobně jako v případě (a) můžeme psát

$$E_{p0} - E_1 = \frac{hc}{\lambda},$$

odkud odvodíme

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{hc}{E_{p0} - E_1} = \\ &= \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1})}{(30,0 \text{ eV} - 2,9 \text{ eV})(1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV})} = \\ &= 4,59 \cdot 10^{-8} \text{ m} = 45,9 \text{ nm.} \quad (\text{Odpověď})\end{aligned}$$

(d) Může elektron v základním stavu absorbovat foton s vlnovou délkou 20,2 nm? Pokud ano, v jakém stavu se elektron po absorpci bude nacházet?

ŘEŠENÍ: Energie fotonu s touto vlnovou délkou je:

$$hf = h \frac{c}{\lambda} = \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})}{(20,2 \cdot 10^{-9} \text{ m})} = 9,847 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 61,5 \text{ eV}, \quad (\text{Odpověď})$$

což je více, než je hloubka potenciálové jámy 30 eV. To znamená, že elektron může absorbovat foton o této energii — jeho absorpce umožní elektronu uniknout z jámy. Stane se volnou částicí o kinetické energii

$$E_k = hf - (E_{p0} - E_1) = 61,5 \text{ eV} - (30 \text{ eV} - 2,9 \text{ eV}) = 34,4 \text{ eV}$$

a jeho stav již nebude kvantovaný.

KONTROLA 4: Na obr. 40.6 jsou znázorněny kvantové stavy elektronu uvězněného v potenciálové jámě konečné hloubky 30 eV. (a) V jakém stavu je elektron, který se s největší pravděpodobností nachází v blízkosti středu jámy? (b) Seřadte tyto tři kvantové stavy sestupně podle velikosti pravděpodobnosti, že se elektron nachází mimo oblast jámy.

40.5 DALŠÍ ELEKTRONOVÉ PASTI

V této části probereme tři různé typy uměle vytvořených elektronových pastí.

Nanokrystaly

Nejsnadnější způsob, jak v laboratoři vytvořit potenciálovou jámu, je připravit vzorek z polovodičového materiálu ve formě prášku, jehož zrna jsou malá — řádově nanometrová — a mají stejnou velikost. Každé takové zrno, nanokrystal, působí jako potenciálová jáma pro elektrony, které jsou v ní zachycené.

Z rov. (40.4) vyplývá, že nejnížší možnou energii elektronu vázaného v nekonečně hluboké potenciálové jámě můžeme zvýšit zmenšením její šířky L . Toto platí i pro jámy, tvořené jednotlivými nanokrystaly — čím menší je nanokrystal, tím vyšší je prahová energie fotonu, který může být absorbován.

Ozáříme-li prášek složený z nanokrystalů světlem, mohou tyto krystalky pohlcovat všechny fotony o energii vyšší, než je určitá prahová energie $E_t = hf_t$ (angl. threshold – práh). To znamená, že mohou absorbovat světlo vlnových délek *menších* než určitá prahová hodnota λ_t , pro kterou platí

$$\lambda_t = \frac{c}{f_t} = \frac{hc}{E_t}. \quad (40.13)$$

Nepohlcené světlo bude odraženo, a proto bude náš nanokrystalický práškový vzorek odrážet světlo všech vlnových délek větších než λ_t .

Díváme-li se na vzorek, vidíme světlo od něj odražené. Velikost krystalků tedy určuje vlnovou délku světla odraženého vzorkem, a tedy i barvu vzorku.

Na obr. 40.8 jsou dva vzorky polovodiče — selenidu kademnatého CdSe; v každém vzorku mají nanokrystaly stejné rozměry. Horní vzorek odráží světlo z červené oblasti spektra. Spodní vzorek se od horního liší *pouze* tím, že je složen z menších nanokrystalů. Z tohoto důvodu je jeho prahová energie E_t vyšší a podle rov. (40.13) je jeho prahová vlnová délka λ_t menší. Tento vzorek má tedy barvu odpovídající menším vlnovým délkám — v tomto případě žlutou.

Nápadný barevný kontrast mezi oběma vzorky je přesvědčivým důkazem kvantování energií vázaných elektronů a závislosti těchto energií na velikosti elektronové pasti. Zdůrazněme ještě jednou, že oba vzorky na obr. 40.8 jsou chemicky identické; liší se pouze velikostí zrn nanokrystalů, z nichž jsou složeny.



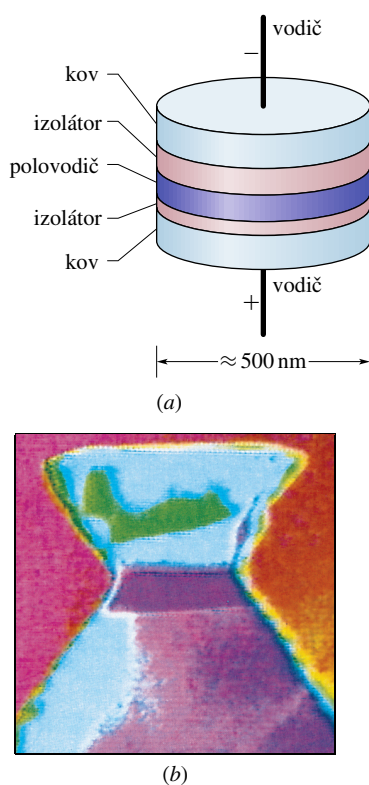
Obr. 40.8 Dva vzorky práškového polovodiče selenidu kademnatého se liší pouze velikostí zrn. Každé zrno se chová jako potenciálová jáma, ve které je vázán elektron. Horní vzorek má zrna větší, takže povolené hladiny energie jsou sobě blíže a prahová energie fotonu, který může být vázaným elektronem absorbován, je menší. Nepohlcené světlo je odraženo, takže se horní vzorek jeví jako červený. Spodní vzorek má zrna menší, povolené hladiny jsou od sebe dál a prahová energie absorbovaného fotonu je vyšší; vzorek se proto jeví jako žlutý.

Kvantové tečky

K výrobě potenciálových jam, které se v mnoha ohledech chovají jako umělé atomy, můžeme použít moderní techno-

logie pro výrobu počítačových čipů. Tyto **kvantové tečky**, jak se jim zpravidla říká, mají slibné aplikace v elektronové optice a počítačové technice.

Jedna taková struktura vypadá jako „sendvič“ tvořený vrstvou polovodiče, znázorněnou fialově na obr. 40.9a, deponovanou mezi dvěma nevodivými vrstvami, z nichž jedna je mnohem tenčí než druhá. K oběma koncům jsou připojeny kovové vrstvy s vodivými kontakty. Materiály jsou voleny tak, aby potenciální energie elektronu ve střední části struktury byla nižší než v sousedních dvou nevodivých vrstvách; tak je zajištěno, že střední část se chová jako potenciálová jáma. Obr. 40.9b představuje fotografii skutečné kvantové tečky; jámě, ve které mohou být jednotlivé elektrony vázány, odpovídá oblast fialové barvy.



Obr. 40.9 Kvantová tečka neboli „umělý atom“. (a) Střední polovodivá vrstva tvoří potenciálovou jámu, ve které jsou vázány elektrony. Spodní nevodivá vrstva je dostatečně tenká, aby umožnila elektronům touto vrstvou tunelovat do centrální části, případně ven, v závislosti na přiloženém napětí mezi oběma vodiči. (b) Fotografie skutečné kvantové tečky. Střední fialový pás odpovídá oblasti, ve které jsou vázány elektrony.

Spodní (nikoli však horní) nevodivá vrstva je tak tenká, aby tudy mohly tunelovat elektrony, je-li mezi oběma vodiči odpovídající napětí. Tímto způsobem můžeme řídit počet elektronů, uvězněných v jámě. Toto uspořádání se vskutku

chová jako umělý atom, u kterého dokážeme nastavit, kolik obsahuje elektronů. Kvantové tečky můžeme uspořádat do dvojrozměrných struktur, které mohou tvořit základ pro výpočetní systémy o velké rychlosti a kapacitě paměti.

Kvantové hradby

Při měření rastrovacím tunelovým mikroskopem (popsaným v čl. 39.9 na obr. 39.15) působí jeho hrot malou silou na jednotlivé atomy, nacházející se na jinak velmi hladkém povrchu. Přesným ovládáním polohy hrotu mohou být jednotlivé atomy „vláčeny“ po povrchu a umístěny na jiném místě. V Almadenském výzkumném středisku IBM užitím této techniky posunovali atomy železa po pečlivě připraveném povrchu tvořeném atomy mědi tak, že atomy železa vytvořily kruh, který pojmenovali **kvantová hradba**. Výsledek je znázorněn na fotografii na začátku této kapitoly. Každý atom železa je umístěn do důlku mezi třemi atomy mědi. Hradba byla vytvořena za nízké teploty (okolo 4 K), aby se atomy železa nemohly náhodně pohybovat po povrchu díky tepelné energii.

Vlnky uvnitř hradby jsou způsobeny de Broglieho vlnami elektronů, které se mohou pohybovat podél měděného povrchu, ale jsou zachyceny v potenciálové jámě, tvořené hradbou. Rozměry vlnek jsou ve výborné shodě s výsledky získanými v rámci kvantové teorie.

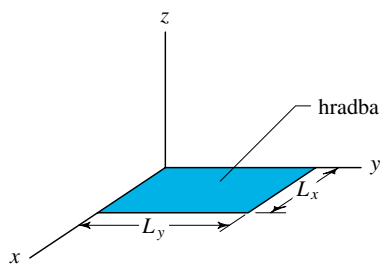
40.6 ELEKTRONOVÉ PASTI VE DVOU A TŘECH ROZMĚRECH

V příštím článku se budeme zabývat atomem vodíku, který pro elektron představuje trojrozměrnou potenciálovou jámu. Abychom se trochu připravili, rozšíříme naši diskusi o nekonečných jámách do dvou, případně tří rozměrů.

Pravoúhlá kvantová hradba

Na obr. 40.10 je znázorněna pravoúhlá plocha, na níž můžeme zachytit elektron v dvojrozměrné verzi jámy z obr. 40.2, dvojrozměrná nekonečně hluboká potenciálová jáma o rozměrech L_x a L_y . Takovou jámu nazýváme *pravoúhlá kvantová hradba*. Tato hradba může být na povrchu tělesa, který zabraňuje pohybu elektronu ve směru osy z , a ten pak nemůže tento povrch opustit. Musíme si představit, že funkce popisující potenciální energii (obdobně jako $E_p(x)$ v obr. 40.2) nabývá nekonečných hodnot podél každé ze stran hradby a zachycuje tak elektron uvnitř hradby.

Řešení Schrödingerovy rovnice pro kvantovou hradbu na obr. 40.10 ukazuje, že pokud má být elektron uvnitř hradby zachycen, musí být jeho vlnová funkce přizpůsobena každé z obou šířek zvlášť, a to stejně jako v případě



Obr. 40.10 Pravoúhlá kvantová hradba o rozměrech L_x a L_y je dvojrozměrnou verzí jednorozměrné jámy z obr. 40.2.

de Broglieho vlny elektronu zachyceného v jednorozměrné jámě. To znamená, že musíme uvažovat kvantování nezávisle jak vzhledem k šířce L_x , tak vzhledem k šířce L_y . Nechť n_x je kvantové číslo, které popisuje de Broglieho vlnu elektronu odpovídající šířce L_x a n_y kvantové číslo popisující de Broglieho vlnu elektronu odpovídající šířce L_y . Stejně jako v případě jednorozměrné potenciálové jámy mohou být kvantová čísla pouze kladná celá čísla.

Energie elektronu závisí na obou kvantových číslech a je rovna součtu energie, kterou by elektron měl, kdyby byl zachycen pouze ve směru osy x , a energie, kterou by měl, kdyby byl zachycen pouze ve směru osy y . Pomocí rov. (40.4) lze tento součet napsat ve tvaru

$$E_{n_x, n_y} = \left(\frac{h^2}{8mL_x^2} \right) n_x^2 + \left(\frac{h^2}{8mL_y^2} \right) n_y^2 = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right). \quad (40.14)$$

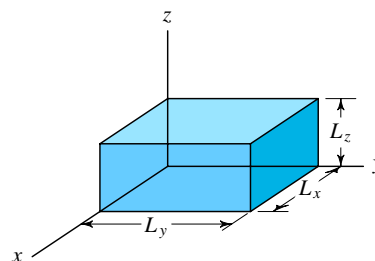
Excitace elektronu absorpcí fotonu a deexcitace elektronu emisí fotonu se řídí stejnými požadavky jako v případě jednorozměrné jámy. Jediný významný rozdíl pro dvojrozměrnou hradbu spočívá v tom, že energie daného kvantového stavu závisí na dvou kvantových číslech (n_x a n_y) místo pouze jediného (n). Obecně mají různé stavy (s různými dvojicemi hodnot n_x a n_y) různé energie. Může ale nastat situace (např. pro $L_x = L_y$), kdy různé stavy mají stejnou energii. Tyto stavy (a jejich energetické hladiny) pak nazýváme *degenerované*. Degenerované stavy se nemohou vyskytovat v jednorozměrné jámě.

Pravoúhlá krabice

Elektron může být rovněž zachycen ve trojrozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě — v *krabici*. Pokud je krabice pravoúhlá, jako je tomu v případě znázorněném na obr. 40.11, pak řešení Schrödingerovy rovnice dává energii elektronu ve tvaru

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right), \quad (40.15)$$

kde n_z představuje třetí kvantové číslo de Broglieho vlny odpovídající šířce L_z .



Obr. 40.11 Pravoúhlá krabice o rozměrech L_x , L_y a L_z je trojrozměrnou verzí jednorozměrné jámy z obr. 40.2.

KONTROLA 5: Použijeme-li stejné značení jako v rovnici (40.14), odpovídají energie $E_{0,0}$, $E_{1,0}$, $E_{0,1}$ a $E_{1,1}$ energií základního stavu elektronu v pravoúhlé hradbě?

PŘÍKLAD 40.5

Elektron je zachycen ve čtvercové dvojrozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě (hradba z obr. 40.10) o rozměrech $L_x = L_y$.

(a) Určete hodnoty energie pěti nejnižších energetických hladin elektronu a sestrojte energetický diagram.

ŘEŠENÍ: Základní myšlenka řešení spočívá v tom, že energie elektronu uvězněného ve dvojrozměrné pravoúhlé jámě závisí na dvou kvantových číslech n_x a n_y podle rov. (40.14). Poněvadž jáma je čtvercová, položíme $L_x = L_y = L$. Pak se rov. (40.14) zjednoduší na tvar

$$E_{n_x, n_y} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2), \quad (40.16)$$

kde n_x a n_y jsou přirozená čísla 1, 2, Stavy s nejnižší energií odpovídají stavům s nejmenšími hodnotami kvantových čísel. Dosadíme-li za n_x a n_y do rov. (40.16) od nejnižší možné hodnoty 1, získáme hodnoty uvedené v tab. 40.1.

Tabulka 40.1 Energetické hladiny

n_x	n_y	ENERGIE ^a	n_x	n_y	ENERGIE ^a
1	3	10	2	4	20
3	1	10	4	2	20
2	2	8	3	3	18
1	2	5	1	4	17
2	1	5	4	1	17
1	1	2	2	3	13
			3	2	13

^a v násobcích $h^2/(8mL^2)$

Z nich je zřejmé, že některé dvojice kvantových čísel (n_x , n_y) odpovídají stejné energii. Například stavy (1, 2) a (2, 1) mají

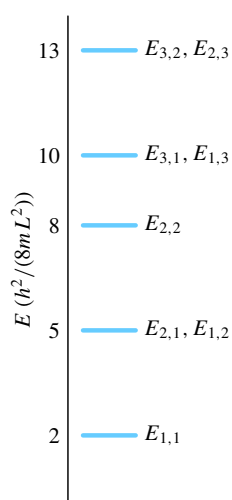
stejnou energii $5h^2/(8mL^2)$. Každá taková dvojice odpovídá degenerované energiové hladině. Povšimněme si rovněž, že stavy (1, 4) a (4, 1) mají poněkud překvapivě menší energii než stav (3, 3).

Z tab. 40.1 při započtení degenerovaných hladin energie můžeme vytvořit energiový diagram z obr. 40.12.

(b) Vyjádřete energiový rozdíl mezi základním stavem a třetím excitovaným stavem (v násobcích $h^2/(8mL^2)$).

ŘEŠENÍ: Z obr. 40.12 vyplývá, že základní stav je popsán dvojicí kvantových čísel (1, 1) a odpovídá energii $2h^2/(8mL^2)$. Vyplývá z něj i to, že třetí excitovaný stav (třetí hladina nad základní hladinou v energiovém diagramu) odpovídá stavům s (1, 3) a (3, 1) s energií $10h^2/(8mL^2)$. Energiový rozdíl ΔE mezi těmito dvěma stavy je tedy roven

$$\begin{aligned}\Delta E &= 10 \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) - 2 \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) = \\ &= 8 \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right). \quad (\text{Odpověď})\end{aligned}$$



Obr. 40.12 Příklad 40.5. Energiový diagram.

40.7 ATOM VODÍKU

Přejdeme nyní od umělých atomů k reálným; jako příklad použijeme nejjednodušší atom — atom vodíku. Tento atom se skládá z jednoho elektronu (náboj $-e$) vázaného k jádru tvořenému jedním protonem (náboj $+e$); mezi nimi působí přitažlivá Coulombova síla. Atom vodíku je, jako ostatně všechny atomy, elektronovou pastí; váže svůj elektron na určitou oblast prostoru. Z omezovacího principu pak vyplývá, že elektron v atomu může existovat pouze v jednom z diskrétních kvantových stavů; každý stav má dobře definovanou energii. Chceme určit tyto energie a vlnové funkce těchto stavů.

Energie kvantových stavů atomu vodíku

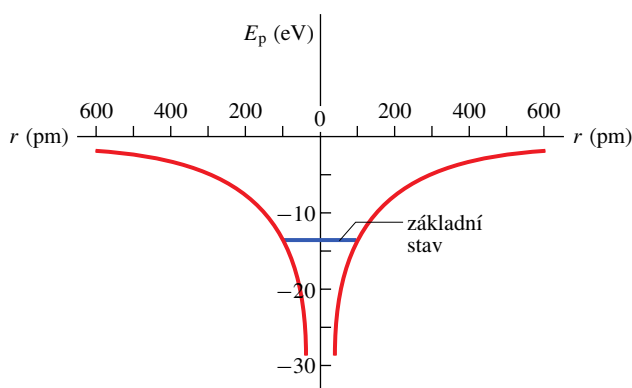
V kap. 25 jsme odvodili rov. (25.43) pro potenciální energii dvoučásticového systému, složeného ze dvou nábojů Q_1 a Q_2 :

$$E_p = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{r},$$

kde r je vzdálenost mezi oběma částicemi. Pro dvoučásticový systém, vodíkový atom, vyjádříme potenciální energii ve tvaru

$$E_p = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(e)(-e)}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}. \quad (40.17)$$

Obr. 40.13 naznačuje trojrozměrnou potenciálovou jámu, ve které je zachycen elektron atomu vodíku. Tato jáma se od jámy konečné hloubky (obr. 40.5) liší tím, že pro atom vodíku je E_p záporné pro všechny hodnoty r proto, že jsme si zvolili nulovou hladinu potenciální energie elektronu pro $r \rightarrow \infty$. Pro jámu konečné hloubky na obr. 40.5 jsme však zvolili (stejně libovolně), že nulovou hodnotu potenciální energie přiřadíme oblasti uvnitř jámy.



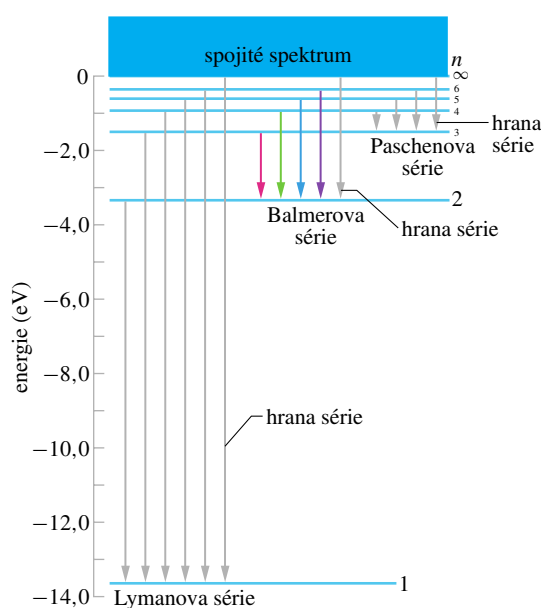
Obr. 40.13 Závislost potenciální energie E_p atomu vodíku na vzdálenosti r mezi elektronem a jádrem umístěným v počátku souřadnic. Závislost je vynesena napravo i nalevo, aby byla naznačena trojrozměrná sféricky symetrická jáma, ve které je elektron „uvězněn“.

Abychom našli vlnové funkce a energie kvantových stavů vodíkového atomu, musíme řešit Schrödingerovu rovnici, do které dosadíme za E_p z rov. (40.17). Protože se však elektron v atomu vodíku nachází v trojrozměrném poli, musíme použít trojrozměrný tvar Schrödingerovy rovnice.

Řešením této rovnice najdeme, že energie kvantových stavů elektronu jsou dány vztahem

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots, \quad (40.18)$$

kde n je kvantové číslo a m je hmotnost elektronu. Nejnižší energie odpovídá základnímu stavu s $n = 1$ a je znázorněna na obr. 40.13. Obr. 40.14 ukazuje energiové hladiny základního a pěti excitovaných stavů, určených odpovídajícími kvantovými čísly n . Je na něm znázorněna rovněž energiová hladina pro nejvyšší možnou hodnotu $n = \infty$, pro niž je $E_n = 0$. Pro jakoukoli větší energii již není elektron vázán k protonu (netvoří již spolu atom) a odpovídající oblast energií v obr. 40.14 je stejně jako u potenciálové jámy konečné hloubky na obr. 40.7 oblastí spojitých (nekvantovaných) energií.



Obr. 40.14 Energiové hladiny atomu vodíku (rov. (40.18)) a přechody z vyšších do nižších energiových hladin, při kterých atom emituje světlo. Přechody jsou sdruženy do sérií, které jsou pojmenovány po vědci, který se studiem příslušné série zabýval.

Kvantované hodnoty energií dané rov. (40.18) jsou také energiemi vodíkového atomu, tj. systému *elektron + proton*. Zpravidla ale přisuzujeme tuto energii pouze elektronu samému, poněvadž jeho hmotnost je daleko menší, než hmotnost protonu. (Obdobně můžeme přiřadit energii systému *míč + Země* pouze samotnému míči.) Můžeme tedy říci, že pokud je elektron vázán v atomu vodíku, mohou energie tohoto *elektronu* nabývat hodnot daných rov. (40.18).

Jak jsme již viděli u elektronu v jiných potenciálových jámách, i elektron v atomu vodíku má tendenci být na nejnižší hladině energie — to znamená v základním stavu. Získá-li však odpovídající množství energie, může přeskočit do stavu excitovaného. Jednou z možností, jak může elektron získat energii k přechodu na vyšší energiové hladiny, je absorpce fotonu. Energie hf fotonu pak musí

být rovna rozdílu energií mezi počáteční a koncovou hladinou energie elektronu. Jakmile je elektron „excitován“ na vyšší energiovou hladinu, nezůstává na ní, ale rychle přejde na nižší energiovou hladinu — je „deexcitován“. Jednou z možností, jak může elektron snížit svou energii, je vyzáření fotonu. V tomto případě bude energie fotonu hf rovna rozdílu energií mezi počáteční vyšší hladinou a koncovou nižší hladinou energie.

Všechny možné kvantové skoky řadíme do *sérií*. Každou z těchto sérií určuje specifická hladina, z níž vycházejí přechody na vyšší úrovně energií, nebo na které končí přechody z hladin vyšších. Na obr. 40.14 jsou znázorněny možné přechody z vyšších energiových hladin pro tři série. Například absorpční a emisní čáry pro všechny možné přechody, které začínají na hladině s $n = 1$ nebo na hladině s $n = 1$ končí, tvoří *Lymanovu sérii*. Každá série je rovněž omezena tzv. *hranou série*, odpovídající přechodu mezi specifickou hladinou série a hladinou s $n = \infty$. Jedná se o největší možný skok mezi kvantovanými energiovými hladinami a odpovídá největší možné změně energie atomu pro danou hladinu energie.

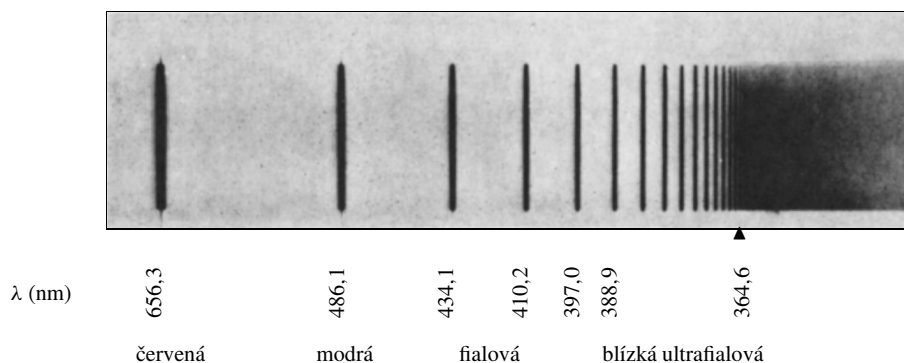
Na obr. 40.15 je spektrografem pořízené spektrum emisních čar *Balmerovy série* atomu vodíku. (Spektrální čáry jsou podobné jako v obr. 37.23 a 37.24.) Balmerova série, již určuje specifická hladina s $n = 2$, má čtyři spektrální čáry ve viditelné oblasti spektra, jak je vyznačeno na obr. 40.15 a rovněž barevně na obr. 40.14. Malý trojúhelník u hodnoty $\lambda = 364,6$ nm na obr. 40.15 vyznačuje hranu série.

Bohrova teorie atomu vodíku

V roce 1913, necelých 13 let před formulací Schrödingerovy rovnice, navrhl Bohr model atomu vodíku, založený na důmyslné kombinaci klasické a raně kvantové koncepce. Jeho základní předpoklad — atomy se nacházejí v diskrétních kvantových stavech s odpovídajícími diskrétními hodnotami energie — byl odvážným porušením klasických představ; až do dnešních dní představuje jeden z nepostradatelných pilířů moderní kvantové fyziky. Tímto předpokladem Bohr dovedně využil principu korespondence (čl. 40.3) nejen k odvození rov. (40.18) pro energie kvantových stavů atomu vodíku, ale také k vyjádření číselné hodnoty efektivního poloměru tohoto atomu (tzv. *Bohrův poloměr*). I přes nesporné úspěchy byl Bohrův model atomu vodíku, založený na představě, že elektron obíhá kolem jádra po orbitách (připomínajících pohyb planet kolem Slunce), v rozporu s principem neurčitosti a byl později nahrazen moderním pravděpodobnostním modelem. Za své vynikající úspěchy v poznávání atomové struktury, které výrazně stimulovaly vývoj fyziky směrem k mo-

Obr. 40.15 Spektrální čáry

Balmerovy série atomu vodíku. Zatímco v obr. 40.14 jsou znázorněny čtyři přechody v rámci této série spolu s hranou série, zde je vidět asi tucet čar série; povšimněte si, že spektrální čáry jsou si tím bližší, čím více se blíží k hraně série, označené trojúhelníkem.



derní kvantové teorii, získal Bohr v roce 1922 Nobelovu cenu.

Kvantová čísla atomu vodíku

Ačkoli energie odpovídající kvantovým stavům atomu vodíku může být charakterizována jediným kvantovým číslem n , jsou vlnové funkce popisující tyto stavy určeny třemi kvantovými čísly, která odpovídají pohybu elektronu v trojrozměrném prostoru. Tato tři kvantová čísla, současně s jejich názvy a možnými hodnotami, jsou uvedena v tab. 40.2.

Tabulka 40.2 Kvantová čísla atomu vodíku

SYMBOL	NÁZEV	POVOLENÉ HODNOTY
n	hlavní kvantové číslo	1, 2, 3, ...
l	orbitální kvantové číslo	0, 1, 2, ..., $n - 1$
m_l	orbitální magnetické kvantové číslo	$-l, -(l - 1), \dots, +(l - 1), +l$

Každý soubor kvantových čísel (n, l, m_l) určuje vlnovou funkci kvantového stavu. Kvantové číslo n , nazývané **hlavní kvantové číslo**, se objevuje v rov. (40.18) pro energii stavu. Uvedeme bez dalšího důkazu, že **orbitální kvantové číslo** l (dříve též zvané **vedlejší**) určuje velikost momentu hybnosti příslušného kvantového stavu. **Magnetické kvantové číslo** m_l (někdy pro zdůraznění zvané orbitální magnetické kvantové číslo) souvisí s orientací vektoru momentu hybnosti v prostoru. Omezení kladená na výběr hodnot kvantových čísel (uvedená v tab. 40.2), nejsou zvolena libovolně, nýbrž přirozeně vyplnou při řešení Schrödingerovy rovnice. Pro základní stav $n = 1$ tato omezení vyžadují, aby $l = 0$ a $m_l = 0$. To znamená, že atom vodíku v základním stavu má nulový moment hybnosti.

KONTROLA 6: Uvažujme kvantové stavy atomu vodíku pro $n = 5$. (a) Kolika hodnot může nabývat orbitální kvantové číslo l ? (b) Je-li $n = 5$ a $l = 3$, kolika možných hodnot může nabývat magnetické kvantové číslo m_l ?

Vlnová funkce základního stavu atomu vodíku

Normovaná vlnová funkce základního stavu atomu vodíku, získaná řešením trojrozměrné Schrödingerovy rovnice, má tvar

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}}e^{-r/a}, \quad (40.19)$$

kde a je konstanta, tzv. *Bohrův poloměr*, s rozměrem délky; může sloužit jako „efektivní“ poloměr atomu vodíku. Ukazuje se, že je rovněž vhodnou jednotkou délky i v jiných případech ve světě atomů. Jeho hodnota je

$$a = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2} = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 52,9 \text{ pm}. \quad (40.20)$$

Podobně jako je tomu i u ostatních vlnových funkcí, nemá funkce $\psi(r)$ v rov. (40.19) zřejmý fyzikální význam; funkce $\psi^2(r)$ jej již má. Výraz $\psi^2(r) dV$ odpovídá pravděpodobnosti, že se elektron bude nacházet v daném infinitezimálním objemovém elementu dV . Poněvadž $\psi^2(r)$ závisí pouze na r , má smysl zvolit za element dV objem mezi dvěma soustřednými kulovými plochami, jejichž poloměry jsou r a $r + dr$. Objemový element lze vyjádřit ve tvaru

$$dV = (4\pi r^2) dr, \quad (40.21)$$

kde $4\pi r^2$ je obsah vnitřní kulové plochy a dr je radiální vzdálenost mezi oběma plochami. Pak

$$\psi^2(r) dV = \frac{4}{a^3} e^{-2r/a} r^2 dr. \quad (40.22)$$

Nyní definujeme **radiální hustotu pravděpodobnosti** $P(r)$ tak, aby výraz $P(r) dr$ udával pravděpodobnost, že se elektron nachází v objemovém elementu, definovaném rov. (40.21). Jinými slovy, definujeme $P(r)$ tak, aby $P(r) dr = \psi^2(r) dV$. Pak z rov. (40.22) dostaneme

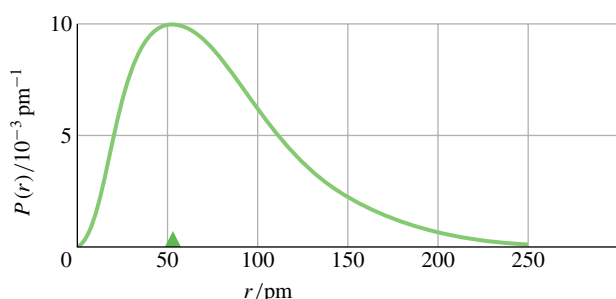
$$P(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a} \quad (\text{radiální hustota pravděpodobnosti pro základní stav atomu vodíku}). \quad (40.23)$$

Obr. 40.16 ukazuje závislost danou rov. (40.23). Plocha pod křivkou je jednotková, tedy

$$\int_0^{+\infty} P(r) dr = 1. \quad (40.24)$$

Tato rovnice jednoduše vyjadřuje fakt, že ve vodíkovém atomu se elektron *někde* v prostoru kolem jádra nacházet musí.

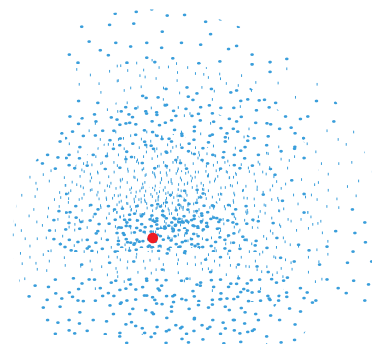
Trojúhelníková značka na vodorovné ose v obr. 40.16 je umístěna ve vzdálenosti jednoho Bohrova poloměru od počátku. Graf ukazuje, že v základním stavu atomu vodíku se elektron nachází s největší pravděpodobností ve vzdálenosti (od středu atomu) odpovídající Bohrově poloměru.



Obr. 40.16 Závislost radiální hustoty pravděpodobnosti $P(r)$ základního stavu atomu vodíku na vzdálenosti r od jádra. Trojúhelníková značka je umístěna ve vzdálenosti jednoho Bohrova poloměru od počátku, který odpovídá středu atomu.

Obr. 40.16 je v ostrém rozporu s populární představou elektronů obíhajících v atomech po definovaných drahách obdobně, jako tomu je v případě planet obíhajících kolem Slunce. *Tento rozšířený názor, jakkoli důvěrně známý, je nesprávný.* Obr. 40.16 ukazuje všechno, co se můžeme dozvědět o elektronu v základním stavu atomu vodíku. Přiměřená otázka zní „Kdy se bude nacházet elektron v tom a v tom bodě?“, ale „Jaká je pravděpodobnost, že se elektron bude nacházet v malém objemu kolem tohoto bodu?“. Obr. 40.17, nazývaný též *bodový graf*, naznačuje pravděpodobnostní povahu vlnové funkce a poskytuje užitečný myšlenkový model atomu vodíku v základním stavu. Atom v tomto stavu lze pokládat za rozmazanou kouli bez ostře definované hranice a bez náznaku orbit.

Pro začátečníka není vůbec jednoduché přestavit si subatomární částice tímto pravděpodobnostním způsobem. Problém spočívá v našem přirozeném nutkání vidět elektron jako nějakou malinkou kuličku, nacházející se v určitém místě v určitý čas a pohybující se po dobře definované dráze. Jenomže elektrony a ostatní subatomární částice prostě takové *nejdou*.



Obr. 40.17 „Bodový graf“ znázorňující hustotu pravděpodobnosti $\psi^2(r)$ — nikoli *radiální* hustotu pravděpodobnosti $P(r)$ — základního stavu atomu vodíku. Hustota teček klesá exponenciálně se zvyšující se vzdáleností od jádra. Takovýto bodový graf poskytuje myšlenkový obraz „elektronového oblaku“ atomu.

Energie základního stavu, získaná po dosazení $n = 1$ do rov. (40.18), je $E_1 = -13,6 \text{ eV}$. Vlnovou funkci danou rov. (40.19) získáme řešením Schrödingerovy rovnice pro tuto hodnotu energie. Ve skutečnosti můžeme tuto rovnici vyřešit pro *jakoukoli* hodnotu energie, řekněme $E = -11,6 \text{ eV}$ nebo $-14,3 \text{ eV}$. To by mohlo naznačovat, že stavy atomu vodíku nejsou kvantované. My ale víme, že kvantované jsou.

Záhada se vyjasní, uvědomíme-li si, že taková řešení Schrödingerovy rovnice nejsou fyzikálně přijatelná – rostou do nekonečna pro $r \rightarrow \infty$. Pravděpodobnost výskytu elektronu by tedy také pro $r \rightarrow \infty$ prudce rostla, a to nedává smysl. Těchto nežádoucích řešení se zbavíme zavedením vhodné *okrajové podmínky* — budeme požadovat, aby fyzikálně přijatelná řešení Schrödingerovy rovnice splňovala podmínku $\psi(r) \rightarrow 0$ pro $r \rightarrow \infty$. Jinými slovy, chceme se zabývat pouze *vázanými* elektrony. Toto omezení vybere ze všech možných řešení Schrödingerovy rovnice pouze některá; jejich energie jsou dány rov. (40.18).

PŘÍKLAD 40.6

(a) Jaká je vlnová délka fotonu s nejmenší možnou energií, emitovaného v rámci přechodů uvnitř Lymanovy série pro spektrální čáry atomu vodíku?

ŘEŠENÍ: Pro všechny série platí, že přechodu, jehož důsledkem je emise (absorpce) fotonu s nejmenší možnou energií, odpovídá přechod mezi specifickou energiovou hladinou série a hladinou, nacházející se těsně nad ní. Z obr. 40.14 je patrné, že pro Lymanovu sérii tomuto přechodu odpovídá přechod z hladiny s $n = 2$ na hladinu s $n = 1$. Z rov. (40.18)

je odpovídající hodnota rozdílu energií rovna

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_2 - E_1 = \\ &= -(13,6 \text{ eV}) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2} \right) = \\ &= 10,2 \text{ eV}.\end{aligned}$$

Odpovídající vlnovou délku lze získat z rov. (39.2) $E = hf$ ve tvaru

$$\Delta E = hf = \frac{hc}{\lambda},$$

kde hf je energie emitovaného fotonu. Řešením této rovnice pro neznámou λ dostáváme

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{hc}{\Delta E} = \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1})}{(10,2 \text{ eV})(1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV})} = \\ &= 1,22 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 122 \text{ nm}.\end{aligned}\quad (\text{Odpověď})$$

Světlo s touto vlnovou délkou se nachází v ultrafialové oblasti elektromagnetického spektra.

(b) Jaká vlnová délka odpovídá hraně Lymanovy série?

ŘEŠENÍ: Z obr. 40.14 je patrné, že hraně série odpovídá přechod z hladiny s $n = \infty$ na hladinu s $n = 1$, což je specifická hladina energie pro tuto sérii. Podle rov. (40.18) je pak energiový rozdíl odpovídající tomuto přechodu roven

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_\infty - E_1 = \\ &= -(13,6 \text{ eV}) \left(\frac{1}{\infty^2} - \frac{1}{1^2} \right) = \\ &= -(13,6 \text{ eV})(0 - 1) = 13,6 \text{ eV}.\end{aligned}$$

Odpovídající vlnovou délku lze určit podobně jako v (a):

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{hc}{\Delta E} = \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1})}{(13,6 \text{ eV})(1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV})} = \\ &= 9,14 \cdot 10^{-8} \text{ m} = 91,4 \text{ nm}.\end{aligned}\quad (\text{Odpověď})$$

Světlo s touto vlnovou délkou se rovněž nachází v ultrafialové oblasti elektromagnetického spektra.

PŘÍKLAD 40.7

Ukažte, že radiální hustota pravděpodobnosti základního stavu atomu vodíku dosahuje svého maxima pro $r = a$.

ŘEŠENÍ: Požadovaná radiální hustota pravděpodobnosti je podle rov. (40.23)

$$P(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a}.$$

Abychom našli maximum funkce, musíme ji zderivovat a položit tuto její první derivaci rovnu nule. Použijeme-li

pravidla pro derivaci součinu funkcí, dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{dP}{dr} &= \frac{4}{a^3} r^2 \left(\frac{-2}{a} \right) e^{-2r/a} + \frac{4}{a^3} 2r e^{-2r/a} = \\ &= \frac{8r}{a^3} e^{-2r/a} - \frac{8r^2}{a^4} e^{-2r/a} = \\ &= \frac{8}{a^4} r(a - r) e^{-2r/a}.\end{aligned}$$

Položíme-li pravou stranu rovnu nule, je výsledná rovnice splněna pro $r = a$. Jinými slovy, pro $r = a$ je $dP/dr = 0$. (Všimněte si, že dP/dr je rovno nule i pro $r = 0$ a $r = \infty$. Avšak tyto podmínky odpovídají *minimu*, nikoli námi požadovanému *maximu*, jak lze snadno zjistit z obr. 40.16.)

PŘÍKLAD 40.8

Pravděpodobnost, že se elektron v základním stavu atomu vodíku bude nalézat uvnitř kulové plochy o poloměru r , je rovna

$$p(x) = 1 - e^{-2x}(1 + 2x + 2x^2),$$

kde x je bezrozměrová veličina rovná podílu r/a . Najděte r pro $p(x) = 0,90$.

ŘEŠENÍ: Hledáme poloměr koule, pro kterou $p(x) = 0,90$. Dosadíme-li tuto hodnotu do vztahu pro $p(x)$, obdržíme

$$0,90 = 1 - e^{-2x}(1 + 2x + 2x^2)$$

neboli

$$10e^{-2x}(1 + 2x + 2x^2) = 1.$$

Musíme tedy určit hodnotu x , splňující tuto rovnici. Není možné ji vyřešit explicitně, ale po několika pokusech na kapesní kalkulačce (nebo si můžete napsat krátký program) lze obdržet hodnotu $x \doteq 2,67$. To tedy znamená, že poloměr koule, ve které se elektron bude 90 % svého času nacházet, je $r = xa \doteq 2,67a$. Vyznačte tuto hodnotu na vodorovnou osu na obr. 40.16 a sami si odpovězte, zda je to hodnota rozumná.

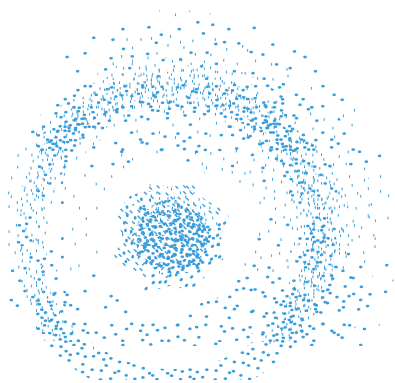
Stavy atomu vodíku s $n = 2$

Podle pravidel uvedených v tab. 40.2 existují čtyři kvantové stavy atomu vodíku s $n = 2$; jejich kvantová čísla jsou vypsána v tab. 40.3. Předpokládejme nejprve stav s $n = 2$ a $l = m_l = 0$; jeho hustota pravděpodobnosti je znázorněna bodovým grafem na obr. 40.18. Všimněte si, že tento graf, podobně jako graf základního stavu v obr. 40.17, je sféricky symetrický. To znamená, že hustota pravděpodobnosti je pouze funkcí radiální souřadnice r a nezávisí na úhlových proměnných θ a φ z obr. 40.19.

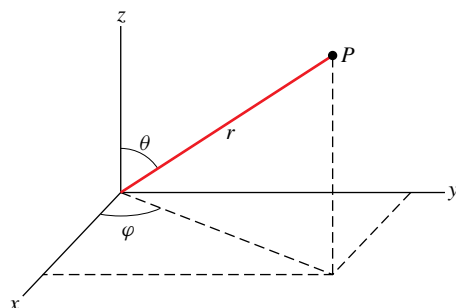
Tabulka 40.3 Kvantová čísla stavů vodíkového atomu s $n = 2$

n	l	m_l
2	0	0
2	1	+1
2	1	0
2	1	-1

Ukazuje se, že všechny stavy s $l = 0$ mají sféricky symetrické vlnové funkce. To je pochopitelné, neboť kvantové číslo l je mírou momentu hybnosti daného stavu. Je-li $l = 0$, je moment hybnosti rovněž nulový, což vyžaduje, aby hustota pravděpodobnosti neměla žádný privilegovaný směr symetrie.



Obr. 40.18 Bodový graf znázorňující hustotu pravděpodobnosti $\psi^2(r)$ výskytu elektronu v atomu vodíku, který je ve stavu s $n = 2$, $l = 0$ a $m_l = 0$. Graf je sféricky symetrický kolem jádra, které se nachází ve středu atomu. Pokles hustoty teček odpovídá místům na povrchu koule, na kterých je $\psi^2(r) = 0$.

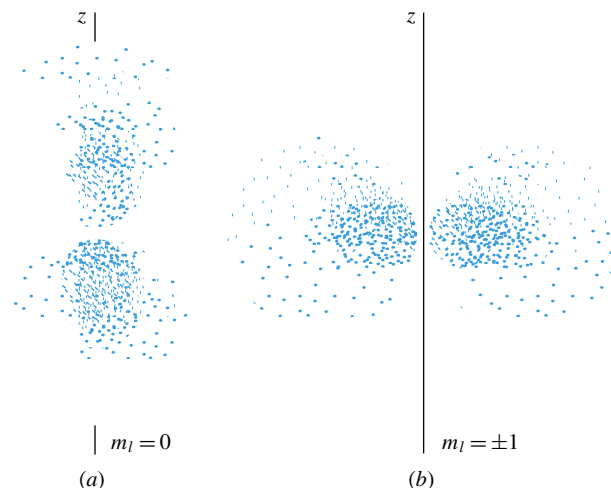


Obr. 40.19 Znárodnění vzájemného vztahu kartézských souřadnic (x, y, z) a souřadnic sférických (r, θ, φ) . Sférické souřadnice jsou obzvlášť vhodné k popisu sféricky symetrických problémů, jako je např. atom vodíku.

Bodový graf funkce $\psi^2(r)$ odpovídající stavům s $n = 2$ a $l = 1$ je zobrazen na obr. 40.20. Stavy s $m_l = +1$ a $m_l = -1$ jsou shodné. Ačkoli jsou tyto grafy symetrické vzhledem k ose z , nejsou sféricky symetrické. To znamená, že hustoty pravděpodobností těchto tří stavů jsou závislé jak na r , tak na úhlové proměnné θ .

Je tu jedna záhada: Co u atomu vodíku určuje osu symetrie tak, jak je patrné z obr. 40.20? Odpověď zní: *Vůbec nic*.

Na řešení této hádanky přijdeme, uvědomíme-li si, že všechny tři stavy, zobrazené na obr. 40.20, mají stejnou energii. Vzpomeňme si, že energie kvantového stavu daná rov. (40.18) závisí pouze na hlavním kvantovém čísle n a nezávisí na kvantových číslech l a m_l . Vskutku, tyto tři stavy *izolovaného* atomu vodíku, znázorněné na obr. 40.20, nelze od sebe experimentálně odlišit.



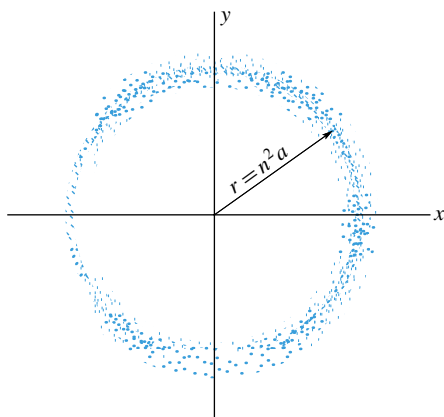
Obr. 40.20 Bodový graf hustoty pravděpodobnosti $\psi^2(r, \theta)$ atomu vodíku ve stavech s $n = 2$ a $l = 1$. (a) Graf pro $m_l = 0$. (b) Graf pro $m_l = +1$ a $m_l = -1$. Z obou grafů vyplývá, že hustota pravděpodobnosti je symetrická kolem osy z .

Sečteme-li hustoty pravděpodobností těchto tří stavů, stane se výsledná hustota pravděpodobnosti sféricky symetrickou, bez přednostní osy symetrie. Tak si můžeme představit, že elektron tráví jednu třetinu svého času v každém ze tří možných stavů z obr. 40.20, případně, že vážený součet tří nezávislých vlnových funkcí určí sféricky symetrickou **podslupku**, charakterizovanou kvantovými čísly $n = 2$, $l = 1$. Jednotlivé stavy od sebe vzájemně odlišíme pouze v případě, když atom vodíku umístíme do vnějšího elektrického nebo magnetického pole. Tři kvantové stavy podslupky s $n = 2$, $l = 1$ pak budou mít různé energie a směr vnějšího pole určí potřebnou osu symetrie.

Stav s $n = 2$, $l = 0$, jehož hustota pravděpodobnosti je vynesena na obr. 40.18, má *rovněž* stejnou energii jako

zmíněné tři stavy z obr. 40.20. Můžeme tedy pohlížet na všechny čtyři kvantové stavy uvedené v tab. 40.3 jako na stavy, které tvoří sféricky symetrickou **slupku** určenou jediným kvantovým číslem n . Důležitost zavedení pojmů slupky a podslupky bude zřejmá v kap. 41, ve které se budeme zabývat atomy s více než jedním elektronem.

Abychom dokončili náš popis atomu vodíku, znázornili jsme v obr. 40.21 bodový graf hustoty pravděpodobnosti atomu vodíku s relativně vysokým hlavním kvantovým číslem ($n = 45$) a nejvyšším možným orbitálním kvantovým číslem podle tab. 40.2 ($l = n - 1 = 44$). Hustota pravděpodobnosti vytváří prstenec, který je symetrický kolem osy z a leží v těsné blízkosti roviny xy . Střední poloměr tohoto prstence je n^2a , kde a je Bohrov poloměr. Tento střední poloměr je více než 2000krát větší než efektivní poloměr atomu vodíku v základním stavu.



Obr. 40.21 Bodový graf radiální hustoty pravděpodobnosti $P(r)$ vodíkového atomu v kvantovém stavu s relativně vysokou hodnotou hlavního kvantového čísla, a to $n = 45$, a orbitálním kvantovým číslem $l = n - 1 = 44$. Tečky se rozprostírají v blízkosti roviny xy v prstenci, který připomíná orbitu elektronu podle klasické představy.

Obr. 40.21 připomíná orbitu elektronu známou z klasické fyziky. Tak jsme opět ilustrovali Bohrov princip korespondence, že totiž pro velké hodnoty kvantových čísel se výsledky získané pomocí kvantové mechaniky blíží k výsledkům získaným pomocí klasické fyziky. Představte si, jak by bodový graf z obr. 40.21 vypadal v případě *opravdu* velkých hodnot kvantových čísel n a l , řekněme $n = 1\,000$ a $l = 999$.

40.8 PŘÍKLAD PODIVNOSTI Kvantové fyziky

Bohr říkával, že pokud nejste z kvantové teorie zmateni, pak ji asi úplně nechápete. Proto se, dříve než ukončíme svou

rozpravu o kvantových jevech, zmíníme o předpovědích kvantové fyziky, které sice vypadají zvláštně, ale jsou nade vší pochybnost potvrzeny experimentálními výsledky.

V roce 1935 se Einstein a jeho spolupracovníci Boris Podolsky a Nathan Rosen zabývali kvantovou mechanikou dvoučásticových systémů. Navrhli „myšlenkový experiment“ (nyní nazývaný *EPR experiment* podle jejich iniciál), který předpověděl výsledky tak podivné, že je Einstein zavrhl s tím, že poukazují na značnou trhlinu v logické výstavbě kvantové mechaniky.

Experiment EPR byl uskutečněn v osmdesátých letech a podivné předpovědi kvantové mechaniky byly skutečně pozorovány. Načrtneme si zde pouze hrubé rysy tohoto EPR experimentu, který pak budeme ilustrovat na základě vhodné analogie.

Zdroj S na obr. 40.22 emituje současně a do opačných směrů dva fotony, označené jako A a B . Každý z fotonů má určitou vlastnost, řekněme X , která může nabývat dvou hodnot, například X_1 a X_2 . (Touto vlastností je ve skutečnosti směr polarizace vlny spojené s fotonem, ale tento detail nás nemusí zajímat.) Vzhledem ke způsobu, jakým byly oba fotony vytvořeny (současně, synchronní emisí), vždy platí, že pokud foton A má hodnotu X_1 , pak foton B má hodnotu X_2 a naopak. Na tom ale zatím není nic divného.



Obr. 40.22 Zdroj S emituje současně dva fotony do vzájemně opačných směrů. Pozorovatel si může libovolně zvolit, kterou ze dvou možných vlastností fotonu A bude měřit. Obdobně i druhý pozorovatel si může libovolně zvolit, kterou ze dvou stejných možných vlastností fotonu B bude měřit on. Avšak v okamžiku, kdy jeden pozorovatel provede měření, je výsledek měření druhého pozorovatele již zcela předvídatelný, ačkoli jsou oba fotony od sebe velmi vzdáleny a oba pozorovatelé se o svých výsledcích vzájemně neinformují.

Tyto dva fotony společně vytvářejí jediný kvantový systém. Ten může existovat ve dvou stavech, které označíme (AX_1, BX_2) a (AX_2, BX_1) . Kvantová mechanika předpovídá, že předtím, než dojde k jakémukoli měření, je *skutečný* stav tohoto dvoufotonového systému dokonalou směsí *obou* stavů, které jsou v ní rovným dílem zastoupeny. Pro názornost si můžete představit, jako kdyby dvoučásticový systém oscilloval mezi těmito dvěma stavy a v každém z nich by setrval stejnou dobu.

Pokud provádíme měření na fotonu A , pozorovatel si může zvolit, zda bude ověřovat, má-li vlastnost X fotonu hodnotu X_1 , nebo X_2 . Řekněme, že změřil hodnotu X_1 . Z toho ovšem vyplývá, že náš dvoučásticový systém

již není ve stavu daném směsí stejně zastoupených stavů (AX_1, BX_2) a (AX_2, BX_1) . Akt měření způsobil, že se systém „zhroutil“ (zkolaboval) do jediného stavu (AX_1, BX_2) . Proto měřením uskutečněným na fotonu B můžeme získat pouze hodnotu X_2 . Krátce řečeno, pokud uskutečníme měření na fotonu A (s možností zvolit pro měření libovolnou hodnotu), automaticky tím odejmeme možnost volby stavu, v jakém se může nalézat foton B. Kvantová mechanika předpovídá platnost tohoto tvrzení i v případě velmi vzdálených fotonů (dokonce i pro kilometry vzdálené fotony), když je prováděno první měření. Žádný div, že Einstein nazval tuto předpověď „strašidelné působení na dálku“. Přesto experimenty provedené v osmdesátých letech prokázaly platnost tohoto myšlenkového pokusu. Většina fyziků přijala výsledky těchto experimentů jako další podporu platnosti kvantové mechaniky.

Nyní si uvedme volnou analogii tohoto pokusu. Předpokládejme, že máme lentilky, které mohou mít dva stavy, buď jsou červené, nebo zelené. Uvažujme například, že se Mařenka a Jeníček potkali v Brně. Mařenka se pak vydala do Prahy a měla dvě lentilky, od každé barvy jednu. Jeníček se vypravil do Ostravy, a v kapse měl také dvě lentilky různých barev. Mařenka se v jednom okamžiku rozhodne jednu ze svých lentilek sníst, aniž by o tom řekla Jeníčkovi, a zjistí, že si vzala červe-

nou lentilku. Když si pak Jeníček kdykoli poté vytáhne z kapsy lentilku, vždy zjistí, že je zelená. Mimoto, Mařenčina zelená a Jeníčková červená lentilka prostě zmizí: systém lentilek zkolaboval do stavu Mařenka–červená, Jeníček–zelená.

V případě, že by si Mařenka tehdy vzala zelenou lentilku, pak by dvojčasticový systém lentilek zkolaboval do stavu Mařenka–zelená, Jeníček–červená a zbývající dvě lentilky by prostě zmizely. V naší analogii tedy Mařenčina svobodná volba v Praze určí barvu lentilky, kterou Jeníček vytáhne z kapsy v Ostravě. Opravdu strašidelné!

Pokud se ale pokusíte experiment Mařenka + Jeníček sami uskutečnit, tak se vám samozřejmě nepovede jej provést tak, jak jsme jej právě popsali — náš příběh je pouhou analogií. Abychom tuto analogii zpřesnili, museli bychom Mařence i Jeníčkovi dát každému jedinou „kvantovou lentilku“, každou zároveň červenou i zelenou, které by velmi rychle korelovaně přecházely mezi dvěma stavy tak, že pokud by Mařenčina lentilka měla jednu barvu, pak Jeníčková lentilka by měla barvu druhou. Takové kvantové mechanické chování je zanedbatelné pro objekty tak velké, jako jsou lentilky, takže je beznadějně snažit se toto chování zjistit. Avšak na kvantové úrovni se tyto jevy opravdu stávají. Může se to zdát podivné, ale takový už náš svět prostě je!

PŘEHLED & SHRNU TÍ

Omezovací princip

Omezovací princip se týká všech typů vln, včetně vln na struně a de Broglieho vln v kvantové mechanice. Vyjadřuje skutečnost, že omezení vlny vede ke kvantování neboli k existenci kvantových stavů s diskrétními hodnotami energie.

Elektron v potenciálové jámě nekonečné hloubky

Nekonečně hluboká jáma představuje zařízení, ve kterém lze zachytit elektron. Z omezovacího principu pak vyplývá, že de Broglieho vlna tohoto zachyceného elektronu bude moci existovat pouze v některém z diskretních stavů. Hodnoty energií těchto stavů jsou dány vztahem

$$E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2 \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots, \quad (40.4)$$

ve kterém L je šířka jámy a n je *kvantové číslo*. *Vlnové funkce* odpovídající těmto stavům jsou

$$\psi_n(x) = A \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots \quad (40.6)$$

Hustota pravděpodobnosti $\psi_n^2(x)$ možného stavu má ten fyzikální význam, že $\psi_n^2(x) dx$ vyjadřuje pravděpodobnost, že se

elektron bude nacházet v intervalu mezi x a $x + dx$. Hustoty pravděpodobnosti pro elektron v nekonečně hluboké potenciálové jámě jsou

$$\psi_n^2(x) = A^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots \quad (40.7)$$

Se zvyšující se hodnotou kvantového čísla n se elektron přibližuje svým chováním elektronu klasickému, zaujímá libovolnou polohu uvnitř jámy se stejnou pravděpodobností. To odpovídá *principu korespondence*: kvantové výsledky přecházejí pro velká kvantová čísla na výsledky, známé z klasické fyziky.

Normování

Konstantu A^2 v rov. (40.7) můžeme určit pomocí *normovací rovnice*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2(x) dx = 1, \quad (40.8)$$

která je matematickým vyjádřením toho, že se elektron *někde* v jámě s jistotou nachází, neboť jistotě odpovídá pravděpodobnost rovná 1.

Energie základního stavu

Z rov. (40.4) vidíme, že nejnižší možná energie elektronu není nulová, nýbrž odpovídá hodnotě $n = 1$. Tato nejnižší hodnota

energie se nazývá *energie základního stavu* elektronu v potenciálové jámě.

Elektron v potenciálové jámě konečné hloubky

Potenciální energie elektronu uvnitř jámy konečné hloubky je o konečnou hodnotu E_{p0} nižší, než je potenciální energie elektronu vně jámy. V jámě konečné hloubky je jen konečně mnoho vázaných stavů. Přípustná vlnová funkce přesahuje i do oblasti vně jámy.

Elektronové pasti ve dvou a třech rozměrech

Kvantované energie elektronu zachyceného ve dvojrozměrné nekonečné potenciálové jámě, která tvoří pravoúhlou hradbu, jsou

$$E_{n_x, n_y} = \left(\frac{h^2}{8mL_x^2} \right) n_x^2 + \left(\frac{h^2}{8mL_y^2} \right) n_y^2 = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right), \quad (40.14)$$

kde n_x je kvantové číslo, pro něž je vlnová funkce elektronu přizpůsobena šířce L_x , a n_y je kvantové číslo, pro něž je vlnová funkce elektronu přizpůsobena šířce L_y . Podobně energie elektronu ve trojrozměrné jámě, která tvoří pravoúhlou krabici, jsou

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right). \quad (40.15)$$

V tomto výrazu představuje n_z třetí kvantové číslo, pro něž je vlnová funkce přizpůsobena šířce L_z jámy.

Atom vodíku

Potenciální energie atomu vodíku má tvar

$$E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}. \quad (40.17)$$

Energie odpovídajících kvantových stavů atomu vodíku jsou

určeny řešením trojrozměrné Schrödingerovy rovnice a mají tvar

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (40.18)$$

kde n je *hlavní kvantové číslo*. K úplnému popisu stavu atomu vodíku jsou potřeba tři kvantová čísla; jejich názvy a možné hodnoty jsou uvedeny v tab. 40.2.

Radiální hustota pravděpodobnosti $P(r)$ je pro atom vodíku definována tak, že $P(r) dr$ udává pravděpodobnost, že se elektron nachází mezi dvěma soustřednými kulovými plochami se středem v jádru, jejichž poloměry jsou r a $r + dr$. Pro atom vodíku v základním stavu platí

$$P(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a}, \quad (40.23)$$

kde a je *Bohrův poloměr*, který má rozměr délky a velikost 52,9 pm. Na obr. 40.16 je vynesena graf $P(r)$ základního stavu.

Obr. 40.18 a 40.20 zobrazují hustoty pravděpodobnosti (nikoli *radiální* hustoty pravděpodobnosti) čtyř kvantových stavů atomu vodíku s $n = 2$. Graf na obr. 40.18 ($n = 2, l = 0, m_l = 0$) je sféricky symetrický. Grafy na obr. 40.20 ($n = 2, l = 1, m_l = 0, +1, -1$) jsou symetrické vzhledem k ose z , ale jejich součet je opět sféricky symetrický.

Všechny čtyři stavy s $n = 2$ mají stejnou energii a je vhodné na ně pohlížet jako na *slupku*, označenou jako slupka $n = 2$. Tři stavy z obr. 40.20 mohou být společně označeny jako *podslupka* $n = 2, l = 1$. Experimentálně nelze tyto čtyři stavy atomu vodíku od sebe odlišit, pokud se vodík nenachází v elektrickém nebo magnetickém poli, kde můžeme definovanovat osu symetrie.

Podivnost kvantové fyziky

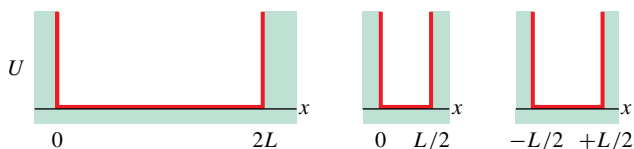
U dvojčásticového kvantového systému libovolná volba typu měření, kterou provádí první pozorovatel na jedné z částic, úplně určí výsledek měření u druhé částice. To znamená, že první pozorovatel naměří některou z možných hodnot a neví předem kterou. Druhý pozorovatel pak ani nemusí měřit — je již určeno, co by zjistil.

OTÁZKY

1. Původní šířku nekonečně hluboké potenciálové jámy zdvojnásobíme. (a) Bude poměr energie nového základního stavu uvězněného elektronu k původní 4, 2, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, nebo jiné číslo? (b) Budou energie vyšších energiových stavů násobeny stejným číslem, nebo nějakým jiným, závislým na kvantovém čísle tohoto stavu?
2. Tři elektrony jsou uvězněny ve třech různých nekonečných potenciálových jámách šířek (a) 50 pm, (b) 200 pm a (c) 100 pm. Seřadte sestupně elektrony podle velikosti energie jejich základního stavu.

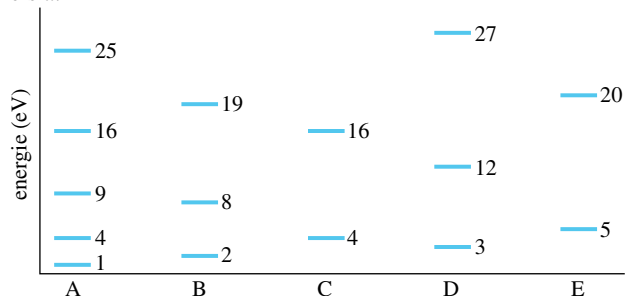
3. Budete-li chtít uvěznit v ideální pasti na obr. 40.1 namísto elektronu pozitron, musíte změnit: (a) geometrii pasti, (b) elektrický potenciál na středním válci, (c) elektrický potenciál na krajních polonekonečných válcích? (Pozitron má stejnou hmotnost jako elektron, ale má kladný náboj.)
4. Elektron je uvězněn v nekonečně hluboké jámě a je ve stavu s $n = 17$. Kolik (a) uzlů, (b) maxim má jeho de Broglieho vlna?
5. Na obr. 40.23 jsou znázorněny tři nekonečné potenciálové jámy podél osy x . Bez písemných výpočtů určete vlnové funkce

$\psi(x)$ základního stavu elektronu, který je v každé z nich uvězněn.



Obr. 40.23 Otázka 5

6. Na obr. 40.24 jsou znázorněny nejnižší energiové hladiny (v elektronvoltech) odpovídající pěti situacím, kdy je elektron uvězněn v nekonečné potenciálové jámě. V jámách B, C, D a E je elektron v základním stavu. Elektron v jámě A budeme excitovat do jeho čtvrtého excitovaného stavu (hodnota energie 25 eV). Elektron pak může deexcitovat zpět do základního stavu za současné emise buď jednoho, nebo více fotonů, což by odpovídalo buď jednomu „dlouhému“ skoku, nebo více „kratším“ skokům. Jaké hodnoty energií *emitovaných* fotonů při těchto deexcitacích jsou stejné jako energie fotonů *absorbovaných* elektronem v základním stavu v ostatních jámách? Určete odpovídající kvantová čísla.



Obr. 40.24 Otázka 6

7. Je hodnota energie základního stavu protonu uvězněného v nekonečné potenciálové jámě větší, menší, nebo rovna energii základního stavu elektronu uvězněného ve stejné potenciálové jámě?

8. Proton a elektron jsou uvězněny ve dvou identických nekonečných potenciálových jámách; obě částice jsou ve svých základních stavech. Je hustota pravděpodobnosti výskytu protonu ve středu potenciálové jámy větší, menší, nebo rovna hustotě pravděpodobnosti výskytu elektronu v tomtéž bodě?

9. Chcete modifikovat potenciálovou jámu konečné hloubky na obr. 40.5 tak, aby v ní uvězněný elektron mohl existovat ve

více než třech kvantových stavech. Měli byste tuto jámu udělat (a) širší, nebo užší, (b) hlubší, nebo mělkší?

10. Elektron je uvězněn v potenciálové jámě takové hloubky, že může existovat v kvantovém stavu s $n = 4$. Kolik (a) uzlů, (b) maxim bude mít uvnitř jámy jeho vlnová funkce?

11. Bez počítání seřadte kvantová čísla tří stavů v jámě z obr. 40.6 sestupně podle vlnové délky de Broglieho vln elektronu.

12. Pro jámu z obr. 40.6 seřadte sestupně tři kvantová čísla podle velikosti pravděpodobnosti, že se elektron bude nacházet mimo interval $0 < x < L$.

13. Elektron uvězněný v potenciálové jámě konečné hloubky na obr. 40.5 je ve stavu s nejnižší energií. Je jeho energie větší, menší, nebo rovna hodnotě v případě, kdyby se nacházel v nekonečně hluboké jámě z obr. 40.2?

14. V tabulce jsou uvedena kvantová čísla pro pět stavů atomu vodíku. Která z nich nejsou možná?

	n	l	m_l
(a)	3	2	0
(b)	2	3	1
(c)	4	3	-4
(d)	5	5	0
(e)	5	3	-2

15. V roce 1996 se fyzikům pracujícím v laboratoři s urychlovačem částic podařilo vytvořit atom antivodíku. Ten se skládá z pozitronu, pohybujícího se v elektrickém poli antiprotonu. Pozitron má stejnou hmotnost jako elektron, ale nese opačný náboj. Antiproton má stejnou hmotnost, ale opačný náboj než proton. Bude spektrum tohoto antivodíku stejné jako spektrum normálního vodíku, nebo bude jiné?

16. (a) Z energiového diagramu atomu vodíku z obr. 40.14 vyplývá, že energie fotonu druhé spektrální čáry v Lymanově sérii je rovna součtu energií dvou jiných čar. Které to jsou? (b) Energie fotonu druhé spektrální čáry v Lymanově sérii je rovněž rovna rozdílu energií dvou dalších čar. Které to jsou?

17. Vodíkový atom je ve svém třetím excitovaném stavu. Do jakého stavu (určete jeho kvantové číslo n) by měl skočit, aby (a) emitoval světlo s nejdelší možnou vlnovou délkou, (b) emitoval světlo s nejkratší možnou vlnovou délkou a (c) absorboval světlo s nejdelší možnou vlnovou délkou?

CVIČENÍ & ÚLOHY

ODST. 40.3 Zachycení elektronu

1C. Chcete zmenšit na polovinu hodnotu základní energie elektronu uvězněného v nekonečně hluboké potenciálové jámě. Kolikrát musíte změnit šířku potenciálové jámy?

2C. Jaká je hodnota energie základního stavu (a) elektronu,

(b) protonu uvězněného v 100 pm široké nekonečné potenciálové jámě?

3C. Jaká musí být šířka nekonečné potenciálové jámy, má-li mít elektron v ní uvězněný ve stavu s $n = 3$ hodnotu energie 4,7 eV?

4C. Předpokládejme, že jádro atomu je ekvivalentní nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce $L = 1,4 \cdot 10^{-14}$ m, což odpoví

vídá typickému rozměru jádra. Jaká by byla energie základního stavu elektronu v takovéto potenciálové jámě? (*Poznámka:* Jádra neobsahují elektrony.)

5C. Hodnota energie základního stavu elektronu v nekonečně hluboké potenciálové jámě je 2,6 eV. Jaká by tato hodnota byla, kdyby se šířka potenciálové jámy zdvojnásobila?

6C. Elektron v nekonečné jámě šířky 250 pm je v základním stavu. Jak velkou energii musí absorbovat, aby se dostal do stavu $s = 4$?

7C. Jaká je jednotka SI pro hustotu pravděpodobnosti výskytu elektronu v nekonečně hluboké potenciálové jámě?

8C. Proton je vázán v nekonečně hluboké potenciálové jámě šířky 100 pm. Jaká je hodnota energie jeho základního stavu?

9C. Ukažte, že podíl $\Delta E/E$ pro elektron v nekonečné potenciálové jámě se pro velká n blíží k hodnotě $2/n$, kde ΔE je definováno rov. (40.5). (Všimněte si, že i když se ΔE se zvyšujícím n neblíží k nule, výraz $\Delta E/E$ ano — v souladu s principem korespondence.)

10Ú. Elektron je uvězněn v nekonečně hluboké potenciálové jámě. (a) Má nějaká dvojice sousedních hladin třikrát větší energiový rozdíl, než je rozdíl mezi hladinami s $n = 3$ a $n = 4$? (b) Jaká dvojice (existuje-li) bude dosahovat dvojnásobku tohoto rozdílu?

11Ú. Elektron je uvězněn v nekonečně hluboké potenciálové jámě. Ukažte, že rozdíl energií ΔE mezi hladinami s kvantovým číslem n a $n + 2$ je roven $h^2(n + 1)/(2mL^2)$.

12Ú. Elektron je uvězněn v nekonečné potenciálové jámě. Existuje taková dvojice sousedních energiových hladin, která by měla energiový rozdíl roven energii elektronu ve stavu s (a) $n = 5$, nebo (b) $n = 6$?

13Ú. Elektron je uvězněn v nekonečně hluboké potenciálové jámě šířky 100 pm a nachází se v základním stavu. Jaká je pravděpodobnost toho, že elektron bude detegován v intervalu šířky $\Delta x = 5,0$ pm kolem bodu x o souřadnici (a) 25 pm, (b) 50 pm a (c) 90 pm? (*Tip:* Zvolený interval je tak úzký, že v něm můžete hustotu pravděpodobnosti považovat za konstantní.)

14Ú. V př. 40.1b se popisuje elektron, který se pohybuje rovnoběžně s osou evakuovaného válce dlouhého 3,0 m. (a) Pro jakou hodnotu kvantového čísla n bude energiový rozdíl mezi sousedními hladinami roven 1 eV, tj. dobře měřitelné hodnotě? (b) Jaká by byla energie elektronu s tímto n ? (c) Je tato energie v relativistické oblasti?

15Ú. Částice je vázána v nekonečně hluboké potenciálové jámě šířky L . Je-li částice v základním stavu, jaká je pravděpodobnost, že se nalézá mezi body (a) $x = 0$ a $x = L/3$, (b) $x = L/3$ a $x = 2L/3$, (c) $x = 2L/3$ a $x = L$?

ODST. 40.4 Elektron v jámě konečné hloubky

16C. Na obr. 40.7 jsou znázorněny energiové hladiny elektronu vázaného v jámě konečné hloubky 30 eV. Může být elektron vázán ve stavu $s = 4$?

17C. Elektron ve stavu s $n = 2$ v jámě konečné hloubky z obr. 40.5 absorbuje z vnějšího zdroje energii 31,7 eV. Jakou má kinetickou energii po této absorpci, předpokládáme-li, že po absorpci je elektron mimo jámu?

18C. (a) Ukažte, že každý člen Schrödingerovy rovnice (40.12) má stejný fyzikální rozměr. (b) Jaká jednotka SI mu odpovídá?

19Ú. Jak napovídá obr. 40.6, klesá hustota pravděpodobnosti v oblastech mimo jámu (tj. pro $x > L$) exponenciálně, podle vztahu

$$\psi^2(x) = Ce^{-2\kappa x},$$

kde C je konstanta. (a) Ukažte, že příslušná vlnová funkce $\psi(x)$ splňuje Schrödingerovu rovnici v jednom rozměru. (b) Jaká musí být hodnota κ , aby to platilo?

20Ú. Ukažte, že pro $x > L$ v konečně hluboké potenciálové jámě z obr. 40.5 je funkce $\psi(x) = De^{2\kappa x}$ řešení Schrödingerovy rovnice v jednom rozměru, kde D je konstanta. Proč je toto řešení fyzikálně nepřijatelné?

21Ú. Jak napovídá obr. 40.6, hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu uvnitř konečně hluboké potenciálové jámy (tj. pro $0 < x < L$) má sinusový tvar, daný vztahem

$$\psi^2(x) = B \sin^2 kx,$$

kde B je konstanta. (a) Ukažte, že vlnová funkce $\psi(x)$ z tohoto vztahu splňuje Schrödingerovu rovnici v jednom rozměru. (b) Jaká musí být hodnota k , aby to platilo?

ODST. 40.6 Elektronové pasti ve dvou a třech rozměrech

22C. Elektron je zachycen v pravoúhlé hradbě z obr. 40.10 s rozměry $L_x = 800$ pm a $L_y = 1\,600$ pm. Jaká je energie základního stavu (v eV)?

23C. Elektron je zachycen v pravoúhlé krabici z obr. 40.11 s rozměry $L_x = 800$ pm, $L_y = 1\,600$ pm a $L_z = 400$ pm. Jaká je energie základního stavu (v eV)?

24Ú. Elektron je zachycen v pravoúhlé hradbě o rozměrech $L_x = L$, $L_y = 2L$. Jakou hodnotu (v násobcích $h^2/(8mL^2)$, kde m je hmotnost elektronu), má (a) energie základního stavu elektronu, (b) energie prvního excitovaného stavu, (c) energie degenerovaného stavu s nejnižší energií a (d) rozdíl energií druhého a třetího excitovaného stavu?

25Ú. Pro zadání úlohy 24 určete frekvenci světla, které může být absorbováno nebo emitováno při přechodu elektronu mezi pěti nejnižšími energiovými hladinami. Řešení uveďte v násobcích $h^2/(8mL^2)$.

26Ú. Elektron je zachycen v krychlové krabici s rozměry $L_x = L_y = L_z = L$. Jakou hodnotu (v násobcích $h^2/(8mL^2)$, kde m je hmotnost elektronu), má (a) energie základního stavu elektronu, (b) energie jeho druhého excitovaného stavu a (c) rozdíl mezi energiemi jeho druhého a třetího excitovaného stavu? Kolik degenerovaných stavů má energii (d) prvního excitovaného stavu a (e) pátého excitovaného stavu?

27Ú. Pro zadání úlohy 26 určete frekvenci, pro kterou může být světlo absorbováno nebo emitováno při přechodu mezi pěti nejnižšími hladinami energie. Odpověď uveďte v násobcích $h^2/(8mL^2)$.

ODST. 40.7 Atom vodíku

28C. Ověřte, že hodnota konstanty v rov. (40.18) je 13,6 eV.

29C. Atom (nikoli vodíkový) absorbuje foton, jehož frekvence je $6,2 \cdot 10^{14}$ Hz. O jakou hodnotu se zvýší energie atomu?

30C. Atom (nikoli vodíkový) absorbuje foton, jehož vlnová délka je 375 nm, a ihned emituje foton o vlnové délce 580 nm. Jakou energii atom absorboval?

31C. Opakujte př. 40.6 pro Balmerovu sérii vodíkového atomu.

32C. (a) Jaká je energie elektronu vodíkového atomu, jehož hustotu pravděpodobnosti ukazuje bodový graf na obr. 40.18? (b) Jaká je minimální energie nutná k odtržení tohoto elektronu od atomu?

33C. Jaká je (a) energie, (b) hybnost a (c) vlnová délka fotonu emitovaného při přechodu vodíkového atomu ze stavu s $n = 3$ do stavu $n = 1$?

34C. Jaký je poměr nejkratší vlnové délky z Balmerovy série a nejkratší vlnové délky z Lymanovy série?

35C. Neutron o kinetické energii 6,0 eV se srazí s vodíkovým atomem v základním stavu v klidu. Vysvětlete, proč tato srážka musí být elastická, tedy proč se musí kinetická energie zachovat. (Tip: Ukažte, že atom vodíku se v důsledku této srážky nemůže nabudit do vyšších kvantových stavů.)

36C. Vodíkový atom je nabuzen ze základního stavu do stavu s $n = 4$. (a) Jak velkou energii musí atom absorbovat? (b) Vypočtěte a znázorněte v energiovém diagramu různé hodnoty energie fotonů, které mohou být emitovány, když se atom vrací zpět do základního stavu.

37C. Vypočtěte radiální hustotu pravděpodobnosti $P(r)$ pro atom vodíku v základním stavu ve vzdálenosti (a) $r = 0$, (b) $r = a$ a (c) $r = 2a$, kde a je Bohrovův poloměr.

38C. Pro atom vodíku v základním stavu vypočtěte (a) hustotu pravděpodobnosti $\psi^2(r)$ a (b) radiální hustotu pravděpodobnosti $P(r)$ pro $r = a$, kde a je Bohrovův poloměr.

39Ú. Jak velkou práci musíme vykonat pro odtržení elektronu od protonu v atomu vodíku, nachází-li se atom v (a) základním stavu, (b) ve stavu s $n = 2$?

40Ú. Jak velký je interval vlnových délek (a) Lymanovy a (b) Balmerovy série? (Interval začíná nejdelší vlnovou délkou a končí vlnovou délkou odpovídající hraně série.) (c) Jak velké jsou odpovídající intervaly frekvence? Vyjádřete frekvenci v terahertzech ($1 \text{ THz} = 10^{12} \text{ Hz}$).

41Ú. Celková energie elektronu v atomu vodíku v základním stavu je $-13,6 \text{ eV}$. Jakou by měl elektron (a) kinetickou energii a (b) potenciální energii, pokud bychom jej považovali za klasickou částici obíhající kolem jádra ve vzdálenosti jednoho Bohrova poloměru od jádra?

42Ú. Vodíkový atom se nachází v klidu v kvantovém stavu s $n = 4$ a přejde do základního stavu za současné emise fotonu. Jakou rychlost získá vodíkový atom při emisi fotonu?

43Ú. Vodíkový atom emituje světlo o vlnové délce 486,1 nm. (a) Jaký přechod v atomu vodíku vyvolal tuto emisi? (b) K jaké sérii přísluší tato vlnová délka?

44Ú. (a) Pomocí energiového diagramu z obr. 40.14 určete kvantová čísla odpovídající přechodu, při kterém atom vodíku emituje světlo o vlnové délce 121,6 nm. (b) Do jaké série náleží tento přechod?

45Ú. Vodíkový atom přejde ze stavu, ve kterém je hodnota jeho *vazební energie* (tj. energie potřebná k úplnému odtržení elektronu) rovna 0,85 eV, do stavu, v němž je hodnota jeho *excitační energie* (tj. energiový rozdíl mezi energií příslušného stavu a základem stavem) rovna 10,2 eV. (a) Jaká je energie fotonu, který je při tomto přechodu emitován? (b) Pomocí energiového diagramu z obr. 40.14 tento přechod určete.

46Ú. Ověřte vlnové délky dané v obr. 40.15 pro viditelné čáry z Balmerovy série.

47Ú. Vodíkový atom emituje světlo o vlnové délce 102,6 nm. Mezi jakými hladinami (n_i, n_f) přechod proběhl?

48Ú. Jaká je pravděpodobnost, že se elektron ve vodíkovém atomu v základním stavu bude nalézat ve vzdálenosti větší, než je Bohrovův poloměr? (Tip: Příklad 40.8.)

49Ú. Vypočtěte pravděpodobnost, že se elektron ve vodíkovém atomu v základním stavu bude nalézat mezi kulovými plochami, jejichž poloměry jsou a a $2a$, kde a je Bohrovův poloměr. (Tip: Příklad 40.8.)

50Ú. Schrödingerova rovnice pro kvantové stavy vodíkového atomu s orbitálním kvantovým číslem $l = 0$ má tvar

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p) \psi = 0.$$

Ověřte, že vlnová funkce (40.19), popisující základní stav atomu vodíku, tuto rovnici splňuje.

51Ú. Ověřte, že radiální hustota pravděpodobnosti (40.23) vodíkového atomu v základním stavu je normovaná a splňuje podmínku

$$\int_0^\infty P(r) dr = 1.$$

52Ú. (a) Kolika možných hodnot může nabývat (pro dané n) orbitální kvantové číslo l ? (b) Kolika možných hodnot může nabývat (pro dané l) orbitální magnetické kvantové číslo m_l ? (c) Kolik hodnot m_l je možných pro dané n ?

53Ú. Pro jaké n by se elektron v atomu vodíku nacházel nejpravděpodobněji 1,0 nm od jádra? Předpokládejme, že l dosahuje své maximální hodnoty $l = n - 1$. (Tip: Vezměte si příklad z obr. 40.21.)

54Ú. Jaká je pravděpodobnost, že se elektron ve vodíkovém atomu v základním stavu bude nacházet mezi dvěma kulovými

plochami, jejichž poloměry jsou r a $r + \Delta r$, je-li (a) $r = 0,500a$ a $\Delta r = 0,010a$ a (b) $r = 1,00a$ a $\Delta r = 0,01a$, kde a je Bohrov poloměr? (Tip: Δr je dostatečně malé, takže lze považovat radiální hustotu pravděpodobnosti mezi r a $r + \Delta r$ za konstantní.)

55Ú* V př. 40.7 jsme pro základní stav atomu vodíku ukázali, že radiální hustota pravděpodobnosti dosahuje maxima, je-li $r = a$, kde a je Bohrov poloměr. Ukažte, že *střední* hodnota $\bar{r}$, definovaná vztahem

$$\bar{r} = \int_0^\infty P(r)r \, dr,$$

má velikost $\bar{r} = 1,5a$. Ve shora uvedeném vztahu pro $\bar{r}$ je každá hodnota $P(r)$ vážena vzdáleností r , ve které se tato radiální hustota určuje. Všimněte si, že střední hodnota $\bar{r}$ je vyšší než hodnota r , ve které dosahuje funkce $P(r)$ svého maxima.

56Ú* Vlnová funkce vodíkového atomu v kvantovém stavu s $n = 2$ a $l = m_l = 0$, uvedeném na obr. 40.18, je dána vztahem

$$\psi_{2,0,0}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a},$$

ve kterém a je Bohrov poloměr a spodní indexy funkce $\psi(r)$ odpovídají hodnotám kvantových čísel n, l, m_l . (a) Vyneste závislost $\psi_{2,0,0}^2(r)$ na r a ukažte, že je v souladu s bodovým grafem na obr. 40.18. (b) Analyticky dokažte, že vlnová funkce $\psi_{2,0,0}^2(r)$ má maximum v $r = 4a$. (c) Najděte radiální hustotu pravděpo-

dobnosti $P_{2,0,0}(r)$ tohoto stavu. (d) Ukažte, že platí

$$\int_0^\infty P_{2,0,0}(r) \, dr = 1,$$

a proto je vlnová funkce $\psi_{2,0,0}(r)$ normovaná.

57Ú. Vlnové funkce tří kvantových stavů atomu vodíku zobrazené na obr. 40.20 mají kvantová čísla $n = 2, l = 1$ a $m_l = 0, +1, -1$ a jsou dány výrazy

$$\psi_{2,1,0}(r, \theta) = \frac{a^{-3/2}}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \cos \theta,$$

$$\psi_{2,1,+1}(r, \theta) = \frac{a^{-3/2}}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} (\sin \theta) e^{+i\varphi},$$

$$\psi_{2,1,-1}(r, \theta) = \frac{a^{-3/2}}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} (\sin \theta) e^{-i\varphi},$$

kde spodní indexy funkcí $\psi(r, \theta)$ odpovídají hodnotám kvantových čísel n, l, m_l a úhly θ a φ jsou definovány na obr. 40.19. Všimněte si, že první vlnová funkce je reálná, ale zbývající dvě, obsahující imaginární jednotku i , jsou komplexní. (a) Nalezněte hustotu pravděpodobnosti pro každou z uvedených vlnových funkcí a ukažte, že jsou v souladu s bodovými grafy na obr. 40.20. (b) Sečtěte všechny tři hustoty pravděpodobností odvozené v (a) a ukažte, že jejich součet je sféricky symetrický a závisí pouze na radiální proměnné r .

41

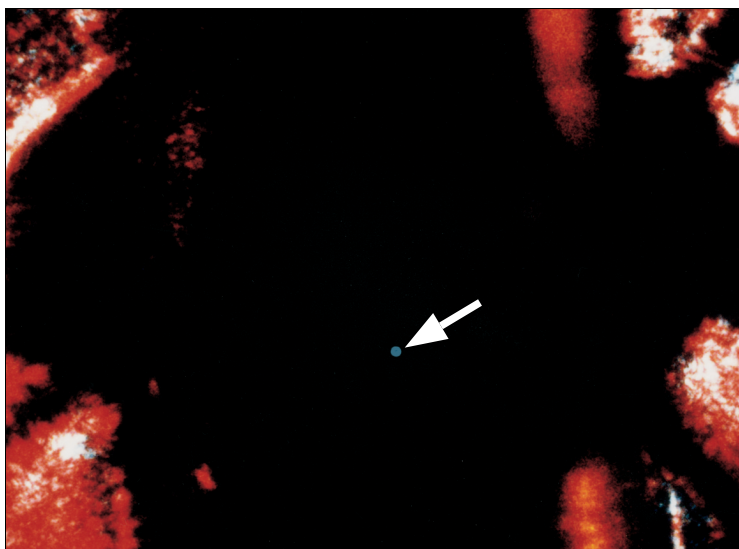
Vše o atomech



Lasery začaly sloužit jako nové zdroje světla v mnoha výzkumných laboratořích na celém světě krátce poté, co byly v šedesátých letech objeveny. Dnes jsou ale lasery doslova všudypřítomné, používáme je jak pro přenos hlasu a dat, tak pro vyměřování, svařování, ale i čtení čárových kódů v obchodech. Na fotografii je zachycena operace prováděná světlem z laseru vyvedeným optickými vlákny. Světlo z laseru, podobně jako světlo z většiny jiných zdrojů, má svůj původ v emisi světla atomy. Čím je tedy světlo z laserů tak zvláštní?

41.1 ATOMY A SVĚT KOLEM NÁS

Na začátku dvacátého století ještě řada předních vědců pochybovala o existenci atomů. Dnes již každý dobře informovaný člověk věří, že atomy existují a jsou základními stavebními kameny hmotného světa. Dnes dokonce můžeme uchopit jednotlivé atomy a posunovat s nimi. Tímto způsobem byla vytvořena kvantová hradba z úvodu kap. 40. Můžeme v ní spočítat všech 48 atomů železa, které na tomto obrázku vytvářejí pravidelný kruh. Můžeme dokonce vyfotografovat jednotlivé atomy emitující světlo. Například slabá modrá tečka uprostřed obr. 41.1 pochází od světla emitovaného jediným atomem barya (přesněji jeho iontem) uvězněným v „pasti“.



Obr. 41.1 Modrý bod na fotografii odpovídá světlu emitovanému jediným atomem barya (přesněji jeho iontem) uvězněným v „pasti“ (University of Washington, USA). Zachycený iont je nucen opakovaně emitovat světlo při kvantovém přechodu mezi stejnou dvojicí energiových hladin. Tečka pak představuje akumulovanou emisi mnoha fotonů.

41.2 NĚKTERÉ VLASTNOSTI ATOMŮ

Zdálo by se, že podrobnosti atomové fyziky jsou na hony vzdáleny našemu každodennímu životu. Avšak uvažme, na kolik následující vlastnosti atomů — tak základní, že o nich přemýšlíme jen málokdy — ovlivňují náš způsob života.

Atomy jsou stabilní. V podstatě všechny atomy, které vytvářejí náš hmatatelný svět, existovaly beze změny miliardy let. Jak by svět vypadal, kdyby se všechny atomy měnily, například po několika týdnech či měsících?

Atomy se sdružují. Atomy se slučují do stabilních molekul. Mohou se také seskupovat a vytvářet pevné látky. V atomu převládá převážně prázdný prostor, přesto můžeme stát na podlaze — tvořené atomy — aniž bychom jí propadli.

Tyto základní vlastnosti atomů mohou být vysvětleny pomocí kvantové fyziky stejně jako tři další méně známé vlastnosti, které vysvětlíme v následujících odstavcích.

Atomy lze seřadit systematicky

Obr. 41.2 ukazuje příklad opakující se vlastnosti prvků v závislosti na poloze prvku v periodické tabulce (dodatek G). Jedná se o graf **ionizační energie** prvků: zobrazuje energii nutnou k odejmutí nejslaběji vázaného elektronu z neutrálního atomu v závislosti na zařazení příslušného prvku v periodické tabulce. Pozoruhodná podobnost chemických a fyzikálních vlastností prvků, nacházejících se ve stejných sloupcích periodické tabulky, dostatečně dokazuje, že atomy jsou sestaveny na základě systematických pravidel.

Prvky jsou v periodické tabulce uspořádány do šesti vodorovných **period**; kromě první začíná každá z period nalevo vysoce reaktivním alkalickým kovem (lithium, sodík, draslík atd.) a končí napravo chemicky inertním vzácným plynem (neon, argon, krypton atd.). Chemické vlastnosti prvků objasňuje kvantová fyzika. Počty prvků v jednotlivých šesti periodách jsou následující:

2, 8, 8, 18, 18, 32.

Tyto hodnoty kvantová fyzika rovněž předpovídá.

Atomy emitují a absorbují světlo

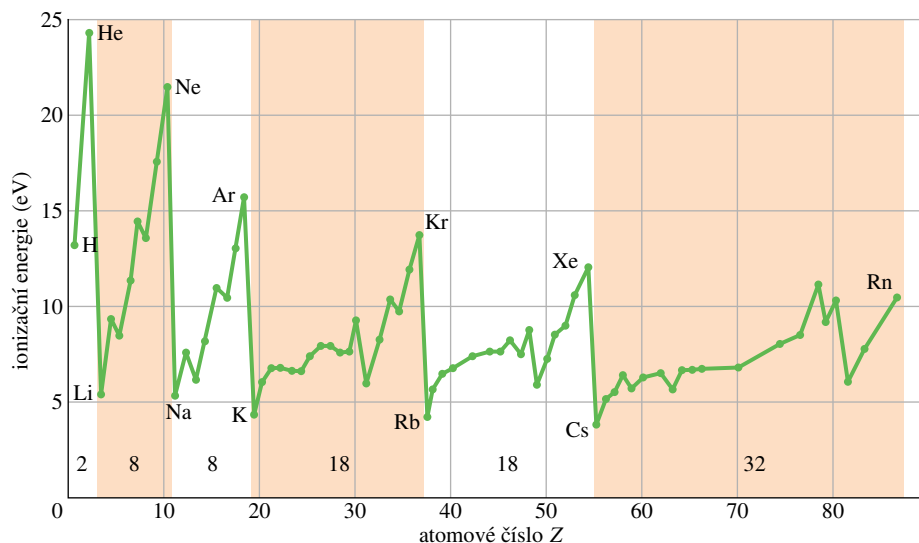
Již jsme poznali, že atomy mohou existovat pouze v diskrétních kvantových stavech, kterým pak přísluší určitá energie. Atom může přejít z jednoho stavu do druhého za současně emise světla (při přechodu na nižší energiovou hladinu), nebo absorpce světla (při přechodu na vyšší hladinu). Frekvence světla f je dána tzv. **Bohrovou frekvenční podmínkou**, postulovanou Bohrem ještě před příchodem moderní kvantové fyziky:

$$hf = E_v - E_n \quad (\text{Bohrova frekvenční podmínka}). \quad (41.1)$$

Zde E_v je energie vyššího kvantového stavu, E_n je energie nižšího kvantového stavu pro daný přechod, hf je energie fotonu emitovaného nebo absorbovaného světla.

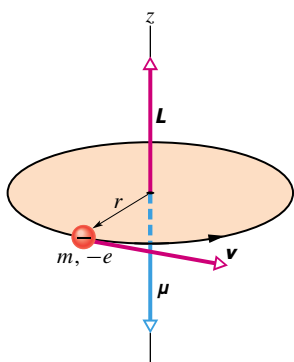
Problém určení frekvence světla vyzářeného nebo pohlceného atomem se tak redukuje na problém nalezení energie kvantových stavů atomu. Kvantová fyzika nám, alespoň v principu, umožňuje tyto energie vypočítat.

Obr. 41.2 Závislost ionizačních energií prvků na jejich atomových číslech ukazuje, že vlastnosti prvků se pravidelně opakují v šesti vodorovných řádcích periodické tabulky prvků. V grafu jsou rovněž uvedeny počty prvků v jednotlivých řádcích periodické soustavy.



Atomy mají moment hybnosti a vlastní magnetismus

Na obr. 41.3 je znázorněna záporně nabitá částice (elektron) obíhající po kruhové dráze kolem nehybného středu (jádra atomu). Ze čl. 32.4 víme, že obíhající částice má jak moment hybnosti $\mathbf{L}$, tak magnetický dipólový moment $\boldsymbol{\mu}$ (protože je ekvivalentní malé proudové smyčce). Jak ukazuje obr. 41.3, jsou oba vektory $\mathbf{L}$ a $\boldsymbol{\mu}$ kolmé na rovinu dráhy, ale vzhledem k zápornému znaménku náboje mají opačný směr.



Obr. 41.3 Klasický model atomu znázorňuje částici o hmotnosti m a s nábojem $-e$ pohybující se rychlostí $\mathbf{v}$ po kružnici o poloměru r . Pohybující se částice má moment hybnosti $\mathbf{L}$ daný vztahem $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$, kde $\mathbf{p}$ je její hybnost $m\mathbf{v}$. Pohyb nabitě částice po uzavřené kruhové dráze je ekvivalentní proudové smyčce, se kterou je spojen magnetický dipólový moment $\boldsymbol{\mu}$, mířící do opačného směru než $\mathbf{L}$.

Model z obr. 41.3 je čistě klasický a nevyjadřuje přesně chování elektronu v atomu. V kvantové fyzice byl tento model pevné dráhy nahrazen pravděpodobnostním modelem,

nejlépe znázorněným pomocí bodového grafu z čl. 40.7. I v kvantové fyzice však stále obecně platí, že každý kvantový stav elektronu v atomu má určitý moment hybnosti $\mathbf{L}$ a magnetický dipólový moment $\boldsymbol{\mu}$, které jsou opačně orientovány. Tyto vektorové veličiny jsou spolu *svázané*.

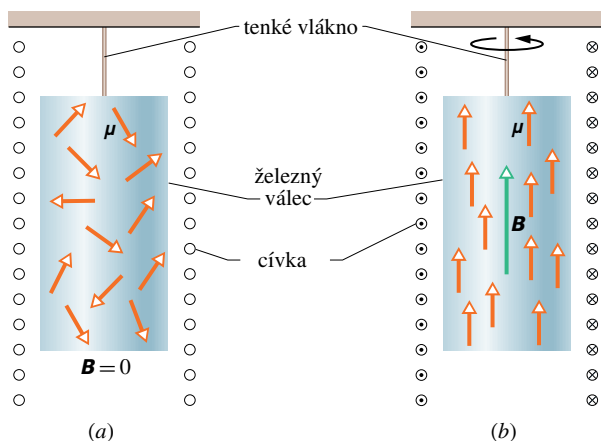
Einsteinův-de Haasův pokus

V roce 1915, mnohem dříve než byla objevena kvantová fyzika, Albert Einstein a holandský fyzik W. J. de Haas uskutečnili chytrý pokus navržený tak, aby potvrdil existenci vzájemné vazby mezi momentem hybnosti a magnetickým dipólovým momentem jednotlivých atomů.

Einstein a de Haas zavěsili železný váleček na tenké vlákno, jak ukazuje obr. 41.4a. Kolem válce pak umístili solenoid, který se však válce nedotýkal. Zpočátku míří magnetické dipóly $\boldsymbol{\mu}$ atomů ve válci náhodně do všech směrů, takže se jejich magnetický účinek navenek vyruší (obr. 41.4a). Jakmile ovšem začne solenoidem protékat proud (obr. 41.4b) a vytvoří se tak magnetické pole $\mathbf{B}$ orientované rovnoběžně s osou válce, zorientují se magnetické dipóly atomů železa tak, aby zaujaly směr daný polem $\mathbf{B}$. Pokud je moment hybnosti $\mathbf{L}$ opravdu svázan s magnetickým dipólovým momentem $\boldsymbol{\mu}$, pak toto natočení magnetických dipólů ve směr vnějšího magnetického pole $\mathbf{B}$ musí mít za následek natočení momentů hybnosti jednotlivých atomů železa v opačném směru, než je směr tohoto pole.

Na váleček na počátku nepůsobí momenty vnějších sil; moment hybnosti válce si musí zachovat svou počáteční nulovou hodnotu. Zapneme-li však pole $\mathbf{B}$, natočí se vůči němu momenty hybnosti atomů nesouhlasně a tím udělují válci jako celku jistý výsledný nenulový moment hybnosti (orientovaný dolů na obr. 41.4b). Aby ovšem celkový

moment hybnosti zůstal zachován (a byl roven původní, tedy nulové hodnotě), začne se válec otáčet kolem své osy tak, aby měl moment hybnosti opačného směru (tj. nahoru v obr. 41.4b).



Obr. 41.4 Uspořádání Einsteinova-de Haasova pokusu. (a) Na počátku je magnetické pole v železném válci nulové a vektory magnetického dipólového momentu μ jednotlivých atomů jsou náhodně orientovány. Momenty hybnosti atomů (nejsou zakresleny) mají opačný směr než vektory magnetických dipólů jednotlivých atomů, a jsou tedy rovněž orientovány náhodně. (b) Po zapnutí magnetického pole B ve směru osy válce se jednotlivé magnetické dipólové momenty uspořádají paralelně s B , což znamená, že momenty hybnosti se uspořádají ve směru opačném k B . Protože na válec na počátku nepůsobí vnější moment sil, zachovává se jeho celkový moment hybnosti a válec jako celek se musí začít otáčet kolem své osy směrem, který je na obrázku vyznačen.

Kdyby nebylo vlákna, otáčel by se válec tak dlouho, dokud by bylo přítomno magnetické pole. Kroucením vlákna se však brzy vytvoří kroutivý moment. Ten zanedlouho otáčení válce zastaví a začne válcem otáčet v opačném směru; přitom se vlákno narovná. Vlákno se bude kroutit a narovnávat, jak se válec bude otáčet kolem své rovnovážné polohy v harmonickém pohybu jako torzní kyvadlo.

Pozorování rotace válce prokázala, že moment hybnosti a magnetický dipólový moment atomu jsou opačně orientované. Navíc prokázala, že moment hybnosti spojený s mikroskopickými atomárními systémy může mít za následek viditelnou rotaci objektu běžné velikosti.

41.3 SPIN ELEKTRONU

Jak jsme se již zmiňovali v čl. 32.4, má elektron, ať uvězněný v atomu nebo volný, svůj vnitřní **spinový moment hybnosti S** , často nazývaný jednoduše **spin**. (Připomeňme si, že *vnitřní* zde znamená, že S je základní charakteristika elektronu, stejně jako jeho hmotnost a elektrický náboj.) Jak ukážeme v dalším odstavci, je velikost S kvantována a závisí na **spinovém kvantovém čísle s** , které je pro elektrony rovno vždy $\frac{1}{2}$ (a stejně tak pro protony a neutrony). Navíc i složka spinu měřená podél libovolně zvolené osy je kvantována a závisí na hodnotě **kvantového spinového magnetického čísla m_s** , která může být pouze $+\frac{1}{2}$, nebo $-\frac{1}{2}$.

Existenci spinu elektronu postulovali dva holandské doktorandi Georg Uhlenbeck a Samuel Goudsmit na základě studia spekter atomů. Kvantově mechanické základy spinu elektronu položil až o několik let později anglický fyzik P. A. M. Dirac, který v roce 1929 vytvořil relativistickou kvantovou teorii elektronu.

Je velmi lákavé představovat si elektron jako malou kuličku a spin jako projev její rotace kolem vlastní osy. Tato klasická představa však neodpovídá skutečnosti, stejně jako nelze brát doslovně klasický model orbit elektronu. V kvantové fyzice je asi nejlepší považovat spinový moment hybnosti za měřitelnou vnitřní vlastnost elektronu; spin prostě nelze spojit s nějakým mechanickým modelem.

Tab. 41.1 uvádí čtyři kvantová čísla n , l , m_l a m_s , která určují kvantové stavy elektronu ve vodíkovém atomu. Stejná kvantová čísla rovněž charakterizují dovolené stavy elektronu i ve víceelektronových atomech.

Tabulka 41.1 Stavy elektronu v atomu

KVANTOVÉ ČÍSLO	SYMBOL	DOVOLENÉ HODNOTY	VYJADŘUJE
hlavní	n	1, 2, 3, ...	vzdálenost od jádra
orbitální	l	0, 1, 2, 3, ..., $(n - 1)$	orbitální moment hybnosti (velikost)
magnetické orbitální	m_l	0, ± 1 , ± 2 , ..., $\pm l$	orbitální moment hybnosti (z -ová složka)
magnetické spinové	m_s	$\pm 1/2$	spinový moment hybnosti (z -ová složka)

Všechny stavy se stejnou hodnotou n tvoří **slupku**.

Ve slupce je $2n^2$ stavů.

Všechny stavy se stejnou hodnotou n a l tvoří **podslupku**.

Všechny stavy v jedné podslupce mají stejnou energii.

V podslupce je $2(2l + 1)$ stavů.

41.4 MOMENTY HYBNOSTI A MAGNETICKÉ DIPÓLOVÉ MOMENTY

S každým kvantovým stavem elektronu v atomu je spojen orbitální moment hybnosti a jemu odpovídající orbitální magnetický dipólový moment. Každý elektron, ať už vázaný nebo volný, má spinový moment hybnosti a odpovídající spinový magnetický dipólový moment. Nejdříve probereme každou z těchto veličin odděleně a poté jejich možné kombinace.

Orbitální moment hybnosti a orbitální magnetický dipólový moment

Velikost L orbitálního momentu hybnosti $\mathbf{L}$ elektronu v atomu je kvantována; to znamená, že může nabývat pouze hodnoty z určitého diskrétního souboru. Tyto hodnoty jsou

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad (41.2)$$

kde l je orbitální (nebo také vedlejší) kvantové číslo. Podle tab. 41.1 musí být l buď nula, nebo kladné celé číslo nejvýše rovné $n - 1$. Například pro stav s $n = 3$ jsou pro l dovoleny pouze hodnoty $l = 2$, $l = 1$ a $l = 0$.

Zvolme v prostoru libovolný směr a označme jej jako osu z . Ukazuje se, že průmět orbitálního momentu hybnosti do osy z je kvantován: složka L_z může nabývat pouze hodnot daných vztahem (32.9)

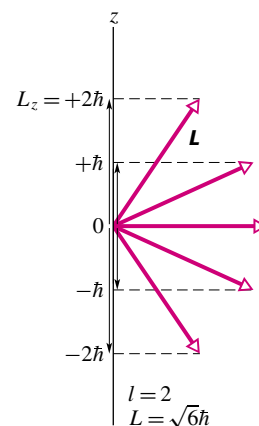
$$L_z = m_l \hbar, \quad (41.3)$$

kde m_l je magnetické kvantové číslo z tab. 41.1. Na obr. 41.5 je znázorněno pět možných hodnot složek L_z orbitálního momentu hybnosti elektronu s $l = 2$ a také příslušné orientace momentu hybnosti $\mathbf{L}$. (Obrázek je poněkud zavádějící — jakmile jsme určili složku vektoru $\mathbf{L}$ ve zvoleném směru, jsou jeho složky v jiných směrech neurčené.) Pro danou hodnotu l existuje $2l + 1$ různých možných hodnot m_l . Omezení kladené kvantovou fyzikou na velikosti složky L_z se nazývá **prostorové kvantování**.

Jak víme z čl. 32.4, je s orbitálním momentem hybnosti spojen orbitální magnetický dipólový moment. Oba momenty jsou svázány rov. (32.8). Je-li tedy kvantován orbitální moment hybnosti, musí být kvantován rovněž orbitální magnetický dipólový moment. Speciálně pro jeho z -ovou složku platí (rov. (32.11))

$$\mu_{\text{orb},z} = -m_l \mu_B. \quad (41.4)$$

Obr. 41.5 Dovolené hodnoty L_z elektronu v kvantovém stavu s $l = 2$. Ke každému orbitálnímu momentu hybnosti $\mathbf{L}$ na obrázku existuje vektor směřující do opačného směru, který představuje orbitální magnetický dipólový moment.



V tomto vztahu je m_l magnetické orbitální kvantové číslo z tab. 41.1 a μ_B je *Bohrův magneton* (rov. (32.5))

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi m} = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} \quad (\text{Bohrův magneton}), \quad (41.5)$$

kde m je hmotnost elektronu a e je velikost jeho náboje.

Všimněme si, že L_z a $\mu_{\text{orb},z}$ z rov. (41.3) a (41.4) mají opačná znaménka. Orbitální moment hybnosti a orbitální magnetický dipólový moment elektronu v atomu mají totiž opačný směr. Je to proto, že náboj *elektronu* je záporný.

Pokud atom vložíme do magnetického pole $\mathbf{B}$, bude směr tohoto pole pro atom zvláště významný. Zvolíme proto v tomto směru osu z a k ní budeme vztahovat orientaci jak magnetického dipólového momentu, tak i s ním spojeného momentu hybnosti (odtud také název magnetické kvantové číslo pro m_l).

Spinový moment hybnosti a spinový magnetický dipólový moment

Velikost S spinového momentu hybnosti $\mathbf{S}$ libovolného elektronu, ať volného či vázaného, má jedinou hodnotu; je dána vztahem

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)} = 0,866\hbar, \quad (41.6)$$

kde $s = \frac{1}{2}$ je spinové kvantové číslo elektronu. Stejně jako v případě orbitálního momentu hybnosti lze i pro spinový moment hybnosti určit pouze jednu jeho složku, a ta je kvantována. Může nabývat pouze dvou hodnot podle vztahu (rov. (32.3))

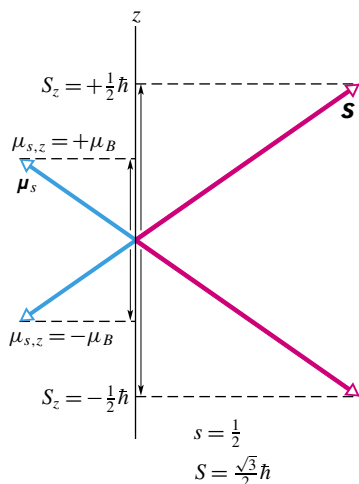
$$S_z = m_s \hbar, \quad (41.7)$$

kde m_s , spinové magnetické kvantové číslo v tab. 41.1; je rovno $+\frac{1}{2}$, nebo $-\frac{1}{2}$.

Podobně jako v případě orbitálních momentů jsou i spinové momenty svázány, a to rov. (32.2). Proto i z -ová složka spinového magnetického dipólového momentu je kvantována a nabývá dvou hodnot podle vztahu (rov. (32.4))

$$\mu_{s,z} = -2m_s\mu_B. \quad (41.8)$$

Na obr. 41.6 jsou znázorněny dva možné průměty spinového momentu hybnosti a průměty spinového magnetického dipólového momentu hybnosti do osy z .



Obr. 41.6 Dovolené hodnoty S_z a μ_z elektronu.

Povšimněme si, že rov. (41.8) popisující spinový magnetický dipólový moment se od rov. (41.4) popisující orbitální magnetický dipólový moment liší faktorem 2.*

KONTROLA 1: Elektron se nachází v kvantovém stavu, ve kterém velikost jeho orbitálního momentu hybnosti L je $2\hbar\sqrt{3}$. Kolik je dovolených projekcí orbitálního magnetického dipólového momentu?

Skládání orbitálních a spinových momentů hybnosti

V atomu, který obsahuje více než jeden elektron, definujeme celkový moment hybnosti J jako součet momentů

* Pokročilejší formulace kvantové mechaniky, **kvantová elektrodynamika**, předpovídá, že faktor „2“ v rov. (41.8) je ve skutečnosti roven 2,002 319 304 76. Tato hodnota byla rovněž experimentálně naměřena. V rámci přesnosti měření souhlasí získaná hodnota s teoretickou předpovědí.

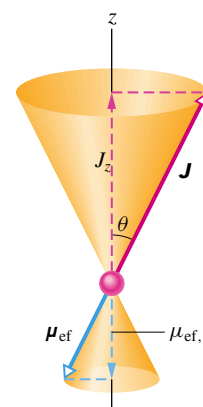
hybnosti jednotlivých elektronů, a to momentů jak orbitálních, tak spinových. Počet elektronů (a počet protonů) v neutrálním atomu je roven **atomovému číslu** (zvanému též **nábojové číslo**) Z . Pro atom platí

$$\mathbf{J} = (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 + \mathbf{L}_3 + \dots + \mathbf{L}_Z) + (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \dots + \mathbf{S}_Z). \quad (41.9)$$

Obdobně i celkový magnetický dipólový moment mnohaelektronového atomu obdržíme jako vektorový součet jednotlivých magnetických dipólových momentů všech elektronů (jak orbitálních, tak spinových). Vzhledem k faktoru 2 v rov. (41.8) však nebude výsledný magnetický dipólový moment atomu směřovat ve směru vektoru $-\mathbf{J}$, ale bude s ním svírat jistý úhel. Průmět součtu magnetických dipólových momentů elektronů do směru vektoru $-\mathbf{J}$ nazýváme efektivní magnetický dipólový moment μ_{ef} atomu.

Jak uvidíme v následujícím odstavci, v typických atomech je vektorový součet orbitálních momentů hybnosti a spinových momentů hybnosti většiny elektronů nulový. Pak $\mathbf{J}$ a μ_{ef} u takových atomů jsou způsobeny poměrně malým počtem elektronů — často jediným valenčním elektronem.

Obr. 41.7 zobrazuje klasický model, který nám pomůže představit si prostorové kvantování vektorů celkového momentu hybnosti $\mathbf{J}$ a efektivního magnetického dipólového momentu μ_{ef} . Oba navzájem svázané vektory rotují kolem osy z tak, že opisují plášť kužele; tento pohyb se nazývá *precese*. Průmět vektorů $\mathbf{J}$ a μ_{ef} do osy z se však při tomto precesním pohybu nemění.



Obr. 41.7 Klasický model znázorňuje vektor celkového momentu hybnosti $\mathbf{J}$ a vektor efektivního magnetického momentu μ_{ef} vykonávající precesní pohyby kolem osy z , určené slabým vnějším magnetickým polem. Oba vektory stále svírají s osou z úhel θ , takže průměty $\mathbf{J}$ a μ_{ef} do osy z zůstávají konstantní po celou dobu precese.

Precese a princip neurčitosti

Heisenbergův princip neurčitosti přináší omezení klasického modelu z obr. 41.7. V polárních souřadnicích platí

$$\Delta J_z \Delta \varphi \approx \hbar, \quad (41.10)$$

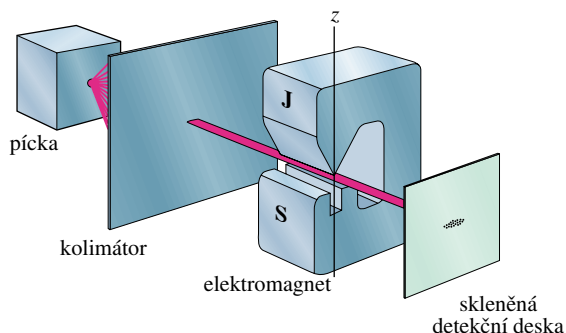
kde φ je úhel rotace kolem osy z na obr. 41.7. To, že složka J_z zůstává po celou dobu pohybu konstantní, znamená, že $\Delta J_z = 0$. Z rov. (41.10) pak vyplývá, že by $\Delta\varphi$ muselo růst nad všechny meze. To znamená, že i když je součet $J_x^2 + J_y^2$ konstantní, nemůžeme jednotlivé složky J_x a J_y změřit. Můžeme shrnout:

Měřitelné jsou jen *průměty* vektorů $\mathbf{J}$ a $\boldsymbol{\mu}_{\text{ef}}$ do směru vnějšího magnetického pole.

41.5 STERNŮV-GERLACHŮV POKUS

V roce 1922 Otto Stern a Walter Gerlach z univerzity v Hamburku experimentálně ověřili prostorové kvantování. Tehdy ještě nebyla kvantová mechanika rozvinutá a pojem spinu elektronu nebyl zaveden. Bylo ale již známo, že atomy mnoha prvků mají vlastní moment hybnosti a magnetický dipólový moment; rovněž byla vyslovena hypotéza prostorového kvantování.

Na obr. 41.8 je schematicky znázorněno uspořádání Sternova-Gerlachova pokusu. V elektrické pídce se vypařuje stříbro; jednotlivé atomy stříbra vycházejí úzkou štěrbinou ve stěně pícky do evakuovaného prostoru. Některé z atomů (které jsou elektricky neutrální, ale mají vlastní magnetický moment) procházejí úzkou štěrbinou v dalším stínítku (nazývaném *kolimátor*) a vytvářejí úzký svazek. Ten prochází mezi pólovými nastavci elektromagnetu a na naší vrstvu stříbra na skleněné detekční desce.



Obr. 41.8 Zařízení, na kterém Stern a Gerlach v roce 1922 prokázali prostorové kvantování. Celý přístroj se nachází ve vakuové aparatuře.

Magnetický dipól v nehomogenním magnetickém poli

Trochu odbočíme a pokusíme se zjistit, jaké síly působí na atomy stříbra v místě pólových nastavců, které mají takový tvar, aby vytvářely *silně nehomogenní* magnetické pole.

Na obr. 41.9a je zobrazen magnetický dipól $\boldsymbol{\mu}$ svírající úhel θ s *homogenním* magnetickým polem. Můžeme si představit, že dipól má severní a jižní pól a jeho magnetický dipólový moment směřuje (podle konvence) od jižního k severnímu pólu. V případě homogenního magnetického pole je výsledná síla působící na dipól rovna nule. Síly $\mathbf{F}_S$ a $\mathbf{F}_J$ z obr. 41.9a, které působí na severní a jižní pól magnetu, mají opačný směr a stejnou velikost a vzájemně se vyruší bez ohledu na orientaci magnetického dipólu. (Obě síly působí na dipól silovým momentem, to však není pro další výklad podstatné.)

Obr. 41.9b, c znázorňují situaci v případě nehomogenního pole. Zde již síly $\mathbf{F}_S$ a $\mathbf{F}_J$ *nemají* stejnou velikost, protože oba póly dipólu se nacházejí v místech s různou velikostí pole. V tomto případě tedy na dipól působí nenulová výsledná síla $\mathbf{F}_v$, jejíž velikost závisí na orientaci dipólu vzhledem k magnetickému poli, tedy na úhlu θ . V obr. 41.9b míří výslednice vzhůru a v obr. 41.9c míří dolů. To nám říká, že atomy stříbra ve svazku na obr. 41.8 budou při průletu mezi pólovými nastavci elektromagnetu vychýleny. Směr a velikost vychýlení svazku budou záviset na orientaci magnetických dipólových momentů stříbra.

Urcíme nyní vychylující sílu, tj. sílu, působící ve směru $\mathbf{B}$, který jsme zvolili za směr osy z . Nejdříve si připomeňme, že podle rov. (29.36) lze vyjádřit potenciální energii magnetického dipólu v poli $\mathbf{B}$ jako

$$E_p = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -(\mu \cos \theta) B, \quad (41.11)$$

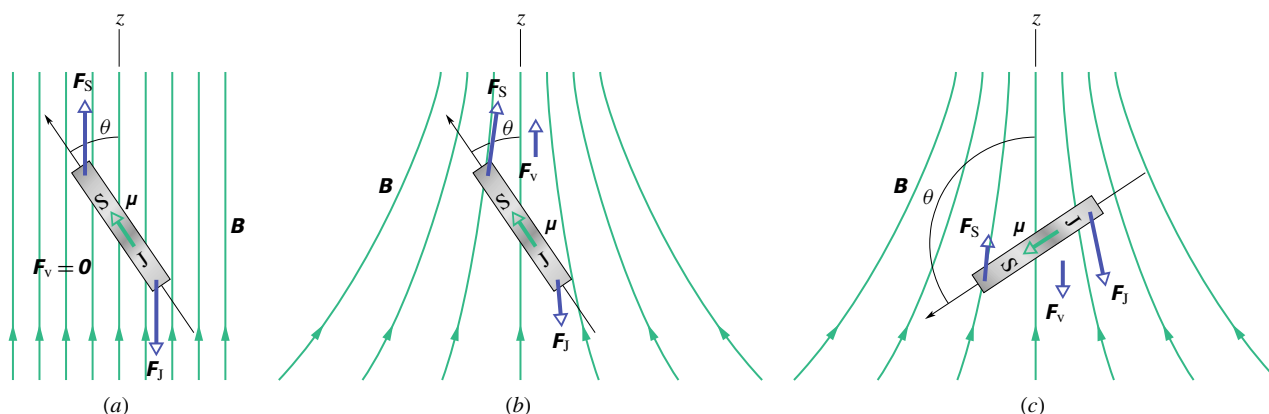
kde θ je úhel, který svírají vektory $\boldsymbol{\mu}$ a $\mathbf{B}$, jak ukazuje obr. 41.9. Z rov. (8.19) pak vyplývá, že složka výsledné síly působící na atom je $F_z = -dE_p/dz$; z rov. (41.11) tedy plyne

$$F_z = -\frac{dE_p}{dz} = (\mu \cos \theta) \frac{dB}{dz}. \quad (41.12)$$

Na obr. 41.9b, c roste B pro rostoucí z , tedy výraz dB/dz , *gradient* magnetického pole, je kladný. Znaménko vychylující síly je dáno úhlem θ . Je-li $\theta < 90^\circ$ (jako je tomu na obr. 41.9b), bude atom vychýlen nahoru; je-li $\theta > 90^\circ$ (obr. 41.9c), bude vychýlen dolů. Rov. (41.12) rovněž vysvětluje, proč je magnetické pole ve Sternově-Gerlachově pokusu silně nehomogenní; vychylující síla je totiž přímo úměrná nikoli B , ale dB/dz .

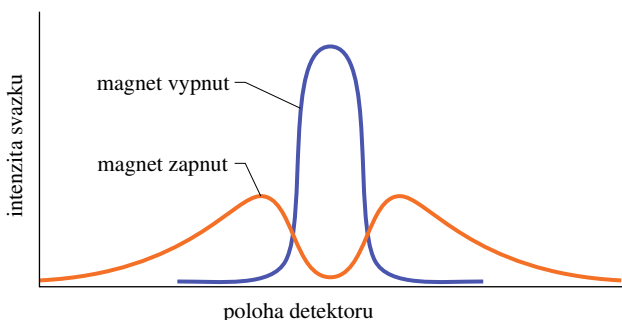
Výsledky pokusu

Po prozkoumání nanášené vrstvy stříbra zjistili Stern s Gerlachem toto: je-li elektromagnet vypnut, prochází svazek ke skleněné desce bez vychýlení; zapneme-li elektromagnet, svazek atomů stříbra se působením magnetického pole rozdělí na dva a každý z nich odpovídá jiné orientaci magnetického momentu atomů stříbra. My nyní víme (ale tehdy



Obr. 41.9 Magnetický dipól, znázorněný jako tyčový magnet se dvěma póly (a) v homogenním magnetickém poli a (b, c) v nehomogenním magnetickém poli. Výsledná síla F_v působící na magnet je nulová v případě (a), orientovaná vzhůru v případě (b) a dolů v případě (c).

to známo nebylo), že se všechny spinové a orbitální magnetické momenty elektronů v atomu stříbra navzájem vyruší s výjimkou spinového magnetického dipólového momentu jediného valenčního elektronu. Z rov. (41.8) a obr. 41.6 vyplývá existence právě dvou svazků, a to je v přesné shodě s tímto pokusem. Stern s Gerlachem zakončili svou tehdejší publikaci slovy: „V těchto výsledcích spatřujeme přímý experimentální důkaz existence prostorového kvantování v magnetickém poli.“ A fyzikové s nimi souhlasili.



Obr. 41.10 Výsledky moderního opakování Sternova-Gerlachova pokusu. Pokud je elektromagnet vypnut, detegujeme pouze jeden svazek; je-li zapnut, původní svazek se rozdělí na dva. Tyto svazky odpovídají souhlasné a nesouhlasné orientaci magnetických momentů atomů cesia vůči vnějšímu magnetickému poli.

Obr. 41.10 ukazuje graf závislosti intenzity svazku na poloze detektoru při nedávném opakování Sternova-Gerlachova pokusu. Experimentátoři použili místo atomů stříbra atomy cesia a detekční část byla rovněž jiná; jinak bylo uspořádání stejné jako na obr. 41.8. Rozdělení původního svazku na dva svazky po zapnutí magnetického pole je zde zvláště zřetelné.

PŘÍKLAD 41.1

Magnet použitý ve Sternově-Gerlachově pokusu vytváří magnetické pole o gradientu $dB/dz = 1,4 \text{ T/mm}$. Dráha l , kterou svazek v magnetu urazí, je $3,5 \text{ cm}$. Teplota ve vypařovací pídce je zvolena tak, aby velikost nejpravděpodobnější rychlosti v pro atomy ve svazku byla 750 m/s . Určete vzdálenost d mezi svazky v okamžiku, kdy opouštějí magnet. (Hmotnost m_{Ag} atomu stříbra je $1,8 \cdot 10^{-25} \text{ kg}$ a jeho efektivní magnetický moment je roven Bohrovu magnetonu, tedy $9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$.)

ŘEŠENÍ: Z druhého Newtonova pohybového zákona a rov. (41.12) určíme zrychlení, se kterým se pohybuje atom stříbra mezi pólovými nastavci magnetu:

$$a_z = \frac{F_z}{m_{\text{Ag}}} = \frac{(\mu \cos \theta)(dB/dz)}{m_{\text{Ag}}}.$$

Pohybuje-li se atom vodorovně s rychlostí o velikosti v , stráví mezi nastavci magnetu dobu $t = l/v$. Svislé vychýlení, s jakým opustí každý atom magnet, je tedy

$$d = \frac{1}{2} a_z t^2 = \frac{1}{2} \frac{(\mu \cos \theta)(dB/dz)}{m_{\text{Ag}}} \left(\frac{l}{v} \right)^2.$$

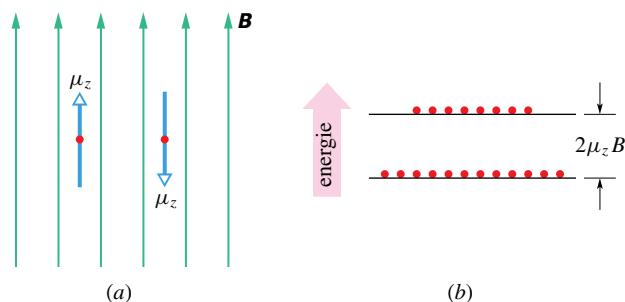
Zajímá-li nás maximální hodnota vychýlení svazku, zvolíme $\theta = 0^\circ$ a po dosazení získáme

$$\begin{aligned} d &= \frac{(\mu \cos \theta)(dB/dz)l^2}{2m_{\text{Ag}}v^2} = \\ &= \frac{(9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1})(1)(1,4 \cdot 10^3 \text{ T} \cdot \text{m}^{-1}) \cdot (3,5 \cdot 10^{-2} \text{ m})^2}{2(1,8 \cdot 10^{-25} \text{ kg})(750 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})^2} = \\ &= 7,85 \cdot 10^{-5} \text{ m} \doteq 0,08 \text{ mm}. \quad (\text{Odpověď}) \end{aligned}$$

Vzdálenost mezi oběma svazky je pak dvojnásobek této hodnoty, tedy $0,16 \text{ mm}$. Oddělení obou svazků sice není velké, ale můžeme je snadno změřit.

41.6 JADERNÁ MAGNETICKÁ REZONANCE

V čl. 32.4 jsme se zmínili, že proton má vlastní spinový moment hybnosti $\mathbf{S}$. S ním je spojen spinový magnetický dipólový moment $\boldsymbol{\mu}$, který má stejný směr jako vektor $\mathbf{S}$, protože proton je kladně nabitá částice. Je-li proton v magnetickém poli $\mathbf{B}$ orientovaném podél osy z , může průmět spinového magnetického dipólového momentu do osy z mít pouze dvě kvantované orientace: souhlasnou, nebo nesouhlasnou se směrem $\mathbf{B}$ (obr. 41.11a). Z rov. (29.37) víme, že se energie pro tyto dvě orientace liší o $2\mu_z B$, což je energie potřebná k převrácení magnetického dipólu v homogenním magnetickém poli. Stav s nižší energií má μ_z ve směru pole $\mathbf{B}$, stav s vyšší energií má μ_z opačné.



Obr. 41.11 (a) Průmět spinu protonu do směru vnějšího magnetického pole má velikost $\frac{1}{2}\hbar$ a může ve vnějším magnetickém poli mít jednu ze dvou kvantovaných orientací. Je-li splněna podmínka vyjádřená v rov. (41.13), může ve zkoumaném vzorku docházet k překlápění spinu protonů z jedné orientace do druhé. (b) Obvykle bývá více protonů ve stavu s nižší energií než ve vyšším energiovém stavu.

Dáme-li do homogenního magnetického pole $\mathbf{B}$ kapku vody, mají protony atomů vodíků μ_z orientovány buď souhlasně, nebo nesouhlasně vůči magnetickému poli $\mathbf{B}$. Působíme-li nyní na kapku střídavým elektromagnetickým polem o vhodné frekvenci f , mohou protony ve stavech s nižší energií přejít do stavů s vyšší energií obrácením orientace μ_z . Tento proces se nazývá **překlápění spinu** (angl. *spin flipping*), protože změna orientace magnetického dipólového momentu protonu vyžaduje převrácení orientace jeho spinu. Frekvence f potřebná k překlápění spinu je dána vztahem

$$hf = 2\mu_z B, \quad (41.13)$$

který je podmínkou vzniku **jaderné magnetické rezonance** (často se užívá zkratka NMR z angl. *nuclear magnetic resonance*). To znamená, že pokud střídavé elektromagnetické pole má způsobovat překlápění spinů protonů v magnetickém poli, musí být energie hf fotonů tohoto

pole rovna rozdílu $2\mu_z B$ energií pro dvě možné orientace μ_z (a tedy i spinu protonu) v tomto poli.

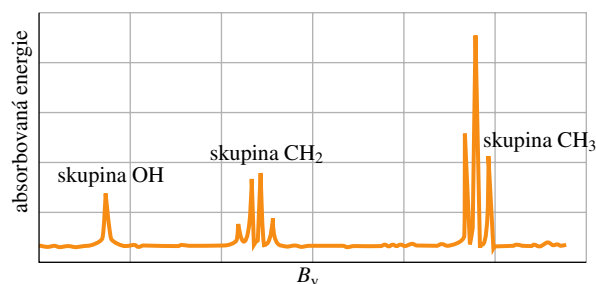
Jakmile spin protonu přejde do stavu s vyšší energií, může se vrátit do stavu s nižší energií vyzářením fotonu o stejné energii hf , dané rov. (41.13). Obvykle bývá více protonů v nižším než ve vyšším energiovém stavu, jak to naznačuje obr. 41.11b. To znamená, že můžeme měřit *absorpci* energie z přiloženého střídavého elektromagnetického pole.

Stálé pole $\mathbf{B}$ v rov. (41.13) ve skutečnosti *není* rovno vnějšímu magnetickému poli $\mathbf{B}_v$, ve kterém je vodní kapka umístěna; k tomuto poli je nutno přidat malé lokální pole $\mathbf{B}_l$, způsobené magnetickými momenty atomů a jader v blízkosti daného protonu. Rov. (41.13) můžeme tedy přepsat do tvaru

$$hf = 2\mu_z(B_v + B_l). \quad (41.14)$$

Při měření absorpčních NMR spekter je obvykle frekvence f proměnného elektromagnetického pole pevně nastavena a měníme velikost B_v . Když je splněna rov. (41.14), zaznamenáme absorpční pík.

Jaderná magnetická rezonance tvoří základ cenné analytické metody obzvláště vhodné k určování neznámých organických sloučenin. Na obr. 41.12 je znázorněno **spektrum jaderné magnetické rezonance** pro ethanol, který má chemický vzorec $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$. Jednotlivé rezonanční píky odpovídají překlápění spinů protonů. Ty se vyskytují pro různé hodnoty B_v , neboť bezprostřední okolí šesti protonů v molekule ethanolu je pro každý proton různé. Spektrum na obr. 41.12 je pro ethanol specifické.



Obr. 41.12 Spektrum jaderné magnetické rezonance pro ethanol. Spektrální čáry představují absorpci energie potřebné pro překlápění spinů protonů. Tři vyznačené skupiny čar odpovídají protonům ve skupinách OH, CH_2 a CH_3 v molekule ethanolu. Poznamenejme, že dva protony ve skupině CH_2 se nacházejí ve čtyřech různých lokálních prostředích. Rozsah vodorovné osy je menší než 10^{-4} T.

Na principu NMR je založena i zobrazovací technika zvaná NMR tomografie (někdy též MRI z anglického *magnetic resonance imaging*), která se velmi úspěšně používá

v lékařské diagnostice. Protony v lidských tkáních jsou obklopeny různým lokálním magnetickým prostředím. Je-li tělo nebo jeho část umístěno do silného vnějšího magnetického pole, mohou být tyto lokální rozdíly při zpracování počítačem zobrazeny podobně jako v rentgenové tomografii. Na obr. 41.13 je touto technikou zobrazen příčný řez lidskou hlavou.



Obr. 41.13 Příčný řez lidskou hlavou vytvořený technikou MRI. Některé ze zobrazených detailů není možné získat ani při použití nejmodernějšího rentgenového tomografu CT (z anglického *computerized tomography*).

PŘÍKLAD 41.2

Kapka vody je vložena do stálého magnetického pole $\mathbf{B}$ o velikosti 1,80 T a střídavého elektromagnetického pole takové frekvence, aby došlo k překlápění spinů protonů. Složka μ_z magnetického dipólového momentu protonu ve směru vektoru $\mathbf{B}$ má velikost $1,41 \cdot 10^{-26} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$. Předpokládejme, že lokální magnetické pole můžeme proti $\mathbf{B}$ zanedbat. Jaká musí být frekvence f a vlnová délka λ střídavého magnetického pole?

ŘEŠENÍ: Z rov. (41.13) plyne

$$f = \frac{2\mu_z B}{h} = \frac{2(1,41 \cdot 10^{-26} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1})(1,80 \text{ T})}{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})} = 7,66 \cdot 10^7 \text{ Hz} = 76,6 \text{ MHz.} \quad (\text{Odpověď})$$

Odpovídající vlnová délka je

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{(3,00 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})}{(7,66 \cdot 10^7 \text{ Hz})} = 3,92 \text{ m.} \quad (\text{Odpověď})$$

Tyto hodnoty frekvence a vlnové délky leží v krátkovlnné rádiové oblasti elektromagnetického spektra.

41.7 PAULIHO VYLUČOVACÍ PRINCIP

V kap. 40 jsme uvažovali řadu elektronových pastí od modelových jednorozměrných pastí až po atom vodíku, reálnou past ve třech rozměrech. Ve všech těchto případech jsme zachycovali pouze jeden elektron. Než se ale pustíme do pastí obsahujících dva a více elektronů, jak tomu bude v dalších dvou částech, uvedeme princip, kterým se řídí každá částice, jejíž spinové kvantové číslo s není nula nebo není celočíselné. Tento princip platí nejen pro elektrony, ale také pro protony a neutrony, které všechny mají $s = \frac{1}{2}$. Nazývá se **Pauliho vylučovací princip** a formuloval ho Wolfgang Pauli v roce 1925. Pro elektrony stanovuje:

Žádné dva elektrony zachycené v téže pasti nemohou mít stejný soubor hodnot kvantových čísel.

Jak uvidíme v kap. 41.9, tento princip znamená, že žádné dva elektrony v atomu nemohou mít stejné čtyři hodnoty kvantových čísel n , l , m_l a m_s . Jinak řečeno: kvantová čísla každé dvojice elektronů v atomu se musí lišit aspoň v jednom kvantovém čísle. Pokud by to tak nebylo, atom by zkolaboval, a nemohli bychom existovat ani my, ani svět, jak jej známe.

41.8 PRAVOÚHLÉ PASTI S VÍCE ELEKTRONY

Abychom se připravili na popis chování více elektronů v atomu, budeme se zabývat dvěma elektrony zachycenými v pravoúhlých pastích popsaných v kap. 40. Opět použijeme kvantová čísla, která odpovídala jednotlivým pastím v případě zachycení pouze jednoho elektronu. Nyní ale budeme uvažovat i spin elektronů. Podle rov. (41.7) může mít elektron spin orientován nahoru $s_{m_s} = \frac{1}{2}$, nebo dolů $s_{m_s} = -\frac{1}{2}$.

Protože zachycujeme dva elektrony v jedné jámě, musíme uvažovat Pauliho vylučovací princip. Z něj plyne, že elektrony nemohou mít stejný soubor kvantových čísel.

1. Jednorozměrná jáma. Aby se elektron mohl nacházet v jednorozměrné jámě z obr. 40.2, musí být jeho vlnová funkce přizpůsobena šířce L jámy, a to vyžaduje jedno kvantové číslo n . Proto každý elektron uvězněný v jámě musí mít určitou hodnotu čísla n a jeho kvantové číslo m_s může být buď $+\frac{1}{2}$, nebo $-\frac{1}{2}$. Dva elektrony mohou mít různé hodnoty n , nebo mohou mít n stejné, pokud jeden z nich má svůj spin orientován nahoru a druhý dolů.

2. Pravoúhlá hradba. Aby se elektron mohl nacházet ve dvojrozměrné hradbě z obr. 40.10, musí být jeho vlnová funkce přizpůsobena rozměrům L_x a L_y hradby, a to vyžaduje dvě kvantová čísla n_x a n_y . Proto každý elektron

zachycený v hradbě musí mít určité hodnoty těchto dvou kvantových čísel n_x a n_y a jeho kvantové číslo m_s může být buď $+\frac{1}{2}$, nebo $-\frac{1}{2}$; má tedy celkem tři kvantová čísla. Podle Pauliho vylučovacího principu musí mít dva elektrony zachycené v pasti alespoň jedno z těchto tří kvantových čísel odlišné.

3. Pravoúhlá krabice. Aby se elektron mohl nacházet v potenciálové krabici z obr. 40.11, musí být jeho vlnová délka přizpůsobena rozměrům L_x , L_y a L_z krabice, a to vyžaduje tři kvantová čísla n_x , n_y a n_z . Proto každý elektron zachycený v krabici musí mít určité hodnoty těchto tří kvantových čísel n_x , n_y a n_z a jeho kvantové číslo m_s může být buď $+\frac{1}{2}$, nebo $-\frac{1}{2}$; má tedy nyní celkem čtyři kvantová čísla. Podle Pauliho vylučovacího principu musí mít dva elektrony zachycené v pasti alespoň jedno z těchto čtyř kvantových čísel odlišné.

Předpokládáme, že do uvedených pravoúhlých pastí umísťujeme více než dva elektrony, vždy postupně jeden po druhém. První elektrony přirozeně zaujmou stavy s nejnižší možnou energií — říkáme, že tuto energiovou hladinu **obsazují**. Pauliho vylučovací princip ale znemožňuje, aby nejnižší energiovou hladinu obsazovalo mnoho elektronů, další elektrony musí zaujmout vyšší energiové hladiny. Jakmile již energiová hladina nemůže být v důsledku Pauliho vylučovacího principu zaplněna více elektrony, říkáme o ní, že je **plná** nebo též **zcela zaplněná**. Naopak energiová hladina, která neobsahuje žádný elektron, je **prázdná** nebo též **neobsazená**. Mezi těmito krajními případy se nacházejí **částečně zaplněné** hladiny. Elektronová konfigurace systému zachycených elektronů je výčet nebo náčrt energiových hladin, na kterých se tyto elektrony nacházejí, nebo soubor hodnot kvantových čísel všech elektronů.

Nalezení celkové energie

Dále chceme určit celkovou energii systému dvou či více elektronů zachycených v pravoúhlé pasti. To znamená, že chceme určit celkovou energii pro každou konfiguraci zachycených elektronů.

Pro jednoduchost předpokládáme, že elektrony spolu neinteragují; jinými slovy, zanedbáme vzájemnou elektrostatickou potenciální energii elektronů. Potom můžeme určit celkovou energii pro libovolnou elektronovou konfiguraci tak, že nejprve určíme energii každého elektronu, jak jsme to udělali v kap. 40, a pak tyto energie sečteme. (V př. 41.3 to uděláme při výpočtu pro případ sedmi elektronů zachycených v pravoúhlé hradbě.)

Vhodný způsob jak uspořádat energiové hladiny daného systému elektronů je energiový diagram systému podobně jako v případě jednoho elektronu v pastích v kap. 40. Nejnižší hladina o energii E_0 odpovídá základnímu stavu

systému. Nejbližší vyšší hladina s energií E_1 odpovídá prvnímu excitovanému stavu systému. Další vyšší hladina E_2 odpovídá druhému excitovanému stavu atd.

PŘÍKLAD 41.3

Sedm elektronů je zachyceno ve čtvercové kvantové hradbě z př. 40.5. Tvoří ji dvojrozměrná nekonečně hluboká jáma o rozměrech $L_x = L_y = L$ (obr. 40.10). Předpokládáme, že elektrony spolu vzájemně elektricky neinteragují.

(a) Jaká je elektronová konfigurace základního stavu systému sedmi elektronů?

ŘEŠENÍ: Elektronovou konfiguraci systému lze určit tak, že všech sedm elektronů budeme přidávat do systému jeden po druhém. Základní myšlenka řešení spočívá v tom, že při zanedbání vzájemné elektrické interakce elektronů lze použít energiový diagram jednoho zachyceného elektronu k tomu, abychom určili, jak v hradbě umístíme sedm elektronů. Takový *energie diagram pro jeden elektron* je na obr. 40.12 a je zde částečně zopakován v obr. 41.14a. Všimněme si, že stavy jsou označeny pomocí s nimi spojené energie E_{n_x, n_y} . Například nejnižší hladina je $E_{1,1}$, pro kterou je kvantové číslo $n_x = 1$ a kvantové číslo $n_y = 1$.

Druhá základní myšlenka řešení spočívá v tom, že zachycené elektrony musí splňovat Pauliho vylučovací princip; to znamená, že dva elektrony nemohou mít stejný soubor hodnot svých kvantových čísel n_x , n_y a m_s .

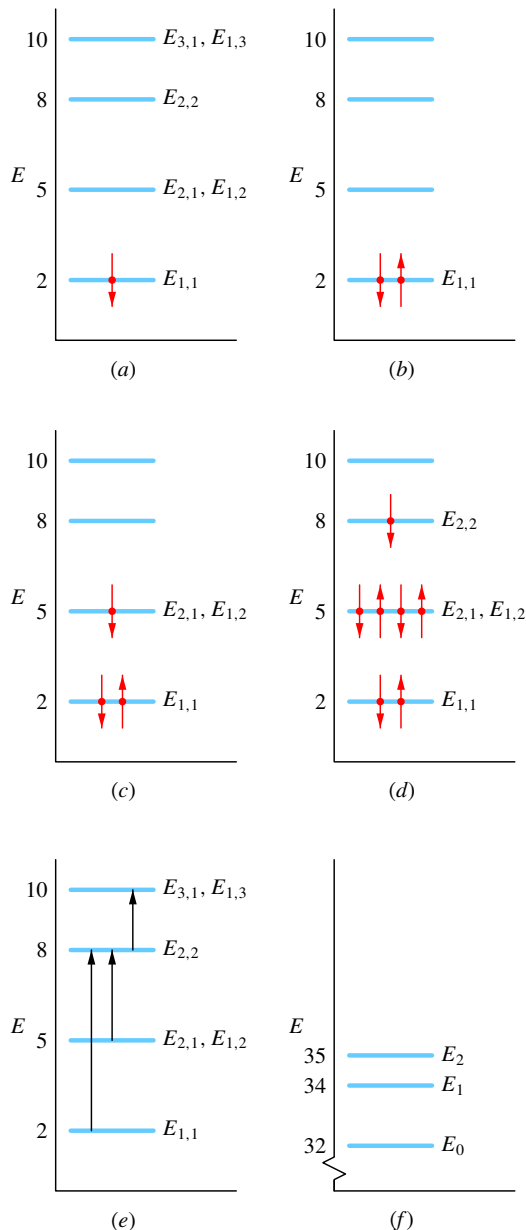
První elektron přijde na energiovou hladinu $E_{1,1}$ a může mít $m_s = +\frac{1}{2}$, nebo $m_s = -\frac{1}{2}$. Zvolme si (libovolně) druhou možnost a nakresleme šipku směrem dolů (odpovídá spinu orientovanému dolů) na energiové hladině $E_{1,1}$ na obr. 41.14a. Druhý elektron na hladině $E_{1,1}$ musí už mít $m_s = +\frac{1}{2}$, aby se jedno z jeho kvantových čísel lišilo od kvantových čísel prvního elektronu. Druhý elektron bude znázorněn šipkou orientovanou nahoru (pro spin nahoru) na hladině $E_{1,1}$ na obr. 41.14b.

Další základní myšlenka, kterou použijeme, je: energiová hladina $E_{1,1}$ je zcela zaplněná, proto třetí elektron nemůže mít stejnou energii. Přijde tedy na další, vyšší hladinu, která odpovídá hodnotám $E_{2,1} = E_{1,2}$ (hladina je degenerovaná). Tento elektron může mít kvantová čísla $n_x = 1, n_y = 2$, nebo $n_x = 2, n_y = 1$. Může mít hodnotu m_s rovnou buď $m_s = +\frac{1}{2}$, nebo $m_s = -\frac{1}{2}$. Zvolme si (opět libovolně) kvantová čísla $n_x = 2, n_y = 1$ a $m_s = -\frac{1}{2}$. Tato volba odpovídá šipce dolů na energiové hladině $E_{1,2}$ a $E_{2,1}$ na obr. 41.14c.

Můžeme nyní ukázat, že i další tři elektrony mohou přijít rovněž na hladinu odpovídající energii $E_{1,2}$ a $E_{2,1}$ tak, že žádný soubor kvantových čísel se neopakuje. Tato hladina pak může obsahovat čtyři elektrony s kvantovými čísly (n_x, n_y, m_s) rovnými

$$(2, 1, -\frac{1}{2}), (2, 1, +\frac{1}{2}), (1, 2, -\frac{1}{2}), (1, 2, +\frac{1}{2}).$$

Tím je hladina zcela zaplněná. To znamená, že sedmý elektron přijde na další energiovou hladinu, kterou je hladina $E_{2,2}$. Zvolme si (libovolně) orientaci jeho spinu dolů s $m_s = -\frac{1}{2}$.



Obr. 41.14 (a) Energiový diagram jednoho elektronu v čtvercové hradbě šířky L . (Energie je vyjádřena v násobcích $h^2/(8mL^2)$.) Elektron se spinem dolů se nachází na nejnižší hladině. (b) Dva elektrony (jeden se spinem nahoru, druhý dolů) se nacházejí na nejnižší hladině jednoelektronového energiového diagramu. (c) Třetí elektron se nachází na další energiové hladině. (d) Elektronová konfigurace základního stavu systému všech sedmi elektronů. (e) Tři přechody, z nichž jeden vede k nabuzení systému sedmi elektronů do prvního excitovaného stavu. (f) Energiový diagram systému se třemi nejnižšími celkovými energiemi systému (v násobcích $h^2/(8mL^2)$).

Na obr. 41.14d je znázorněno všech sedm elektronů v jednoelektronovém energiovém diagramu. V hradbě máme sedm elektronů v konfiguraci, které odpovídá nejmenší energie

a která splňuje Pauliho vylučovací princip. Elektronová konfigurace základního stavu systému je znázorněna na obr. 41.14d a je vypsána v tab. 41.2.

Tabulka 41.2 Konfigurace základního stavu

n_x	n_y	m_s	ENERGIE ^a
2	2	$-\frac{1}{2}$	8
2	1	$+\frac{1}{2}$	5
2	1	$-\frac{1}{2}$	5
1	2	$+\frac{1}{2}$	5
1	2	$-\frac{1}{2}$	5
1	1	$+\frac{1}{2}$	2
1	1	$-\frac{1}{2}$	2
Celkem			32

^a v násobcích $h^2/(8mL^2)$

(b) Jaká je celková energie systému sedmi elektronů v základním stavu (v násobcích $h^2/(8mL^2)$)?

ŘEŠENÍ: Základní myšlenka řešení je v tom, že celková energie E_0 systému v základním stavu je dána součtem energií jednotlivých elektronů v konfiguraci základního stavu systému. Energii každého elektronu lze získat z tab. 40.1, která je částečně přepsána do tab. 41.2, nebo z obr. 41.14d. Na první (nejnižší) energiové hladině se nacházejí dva elektrony, na druhé hladině čtyři a na třetí hladině jeden. Můžeme tedy psát

$$E_0 = 2 \left(2 \frac{h^2}{8mL^2} \right) + 4 \left(5 \frac{h^2}{8mL^2} \right) + 1 \left(8 \frac{h^2}{8mL^2} \right) = 32 \frac{h^2}{8mL^2}. \quad (\text{Odpověď})$$

(c) Jakou energii musíme do systému dodat, aby byl vybuzen do prvního excitovaného stavu, a jaká je energie tohoto stavu?

ŘEŠENÍ: Základní myšlenky řešení jsou:

1. Má-li být systém vybuzen, musí jeden z jeho sedmi elektronů z obr. 41.14d přeskočit do vyššího stavu.

2. Pokud k takovému skoku dojde, změna energie elektronu (a tedy i systému) musí být $\Delta E = E_v - E_n$ (rov. (41.1)), kde E_n je energie nižší hladiny, na které přeskok začíná, a E_v je energie vyšší hladiny, na které přeskok končí.

3. Musí platit Pauliho vylučovací princip; to znamená, že elektron *nemůže* přeskočit na hladinu, která je již zcela zaplněná.

Uvažujeme tři přeskoky znázorněné na obr. 41.14e; všechny jsou Pauliho vylučovacím principem dovoleny, poněvadž se jedná o přeskoky na prázdné nebo jen částečně zaplněné hladiny. V jednom z těchto přeskoků přejde elektron z hladiny $E_{1,1}$ na částečně zaplněnou hladinu $E_{2,2}$. Změna jeho energie je

$$\Delta E = E_{2,2} - E_{1,1} = 8 \frac{h^2}{8mL^2} - 2 \frac{h^2}{8mL^2} = 6 \frac{h^2}{8mL^2}.$$

(Předpokládáme, že orientace spinu přecházejícího elektronu je taková, jak je potřeba.)

Další z možných skoků na obr. 41.14e odpovídá přeskočení elektronu z degenerované hladiny $E_{2,1}$ a $E_{1,2}$ na částečně zaplněnou hladinu $E_{2,2}$. Změna jeho energie je

$$\Delta E = E_{2,2} - E_{2,1} = 8 \frac{h^2}{8mL^2} - 5 \frac{h^2}{8mL^2} = 3 \frac{h^2}{8mL^2}.$$

Při třetím z možných přeskoků na obr. 41.14e přechází elektron z hladiny $E_{2,2}$ na neobsazenou, degenerovanou energiovou hladinu $E_{1,3} = E_{3,1}$. Změna jeho energie je

$$\Delta E = E_{1,3} - E_{2,2} = 10 \frac{h^2}{8mL^2} - 8 \frac{h^2}{8mL^2} = 2 \frac{h^2}{8mL^2}.$$

Ze všech tří zmíněných přeskoků odpovídá posledně uvedený nejmenší možné změně energie ΔE . Můžeme uvažovat ještě další přechody, ale žádný by nevyžadoval méně energie. Aby systém přešel ze svého základního stavu do prvního excitovaného stavu, musí elektron z hladiny $E_{2,2}$ přejít na prázdnou degenerovanou hladinu $E_{1,3} = E_{3,1}$ a potřebná energie je

$$\Delta E = 2 \frac{h^2}{8mL^2}. \quad (\text{Odpověď})$$

Energie prvního excitovaného stavu systému E_1 je pak

$$\begin{aligned} E_1 &= E_0 + \Delta E = 32 \frac{h^2}{8mL^2} + 2 \frac{h^2}{8mL^2} = \\ &= 34 \frac{h^2}{8mL^2}. \quad (\text{Odpověď}) \end{aligned}$$

Tuto energii E_1 a energii základního stavu systému E_0 můžeme znázornit v energiovém diagramu *celého systému*, jako je tomu na obr. 41.14f.

41.9 STRUKTURA PERIODICKÉ SOUSTAVY PRVKŮ

Čtyři kvantová čísla uvedená v tab. 41.1 zcela určují kvantové stavy jednotlivých elektronů ve víceelektronovém atomu. Vlnové funkce těchto stavů se však liší od vlnových funkcí odpovídajících stavů elektronu ve vodíkovém atomu, poněvadž potenciální energie daného elektronu ve víceelektronovém atomu je určena nejen nábojem a polohou jádra atomu, ale i náboji a polohou ostatních elektronů v tomto atomu. Schrödingerovu rovnici v případě víceelektronových atomů lze řešit numericky — přinejmenším v principu — pomocí počítače.

Jak jsme již uvedli v čl. 40.7, tvoří všechny stavy se stejnými hodnotami kvantových čísel n a l podslupku. Pro

danou hodnotu l existuje $2l + 1$ možných hodnot magnetického kvantového čísla m_l a pro každé m_l pak existují dvě možné hodnoty spinového kvantového čísla m_s . V dané podslupce je tedy $2(2l + 1)$ možných stavů. Ukazuje se, že *všechny stavy v dané podslupce mají stejnou energii*, jejíž hodnota je určována především hodnotou n a v menší míře hodnotou l .

K označení podslupek často nahrazujeme hodnoty l písmeny:

$$\begin{array}{ccccccccc} l = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \dots \\ & s & p & d & f & g & h & \dots \end{array}$$

V tomto značení bude podslupka s $n = 3, l = 2$ označena jako $3d$.

Přiřazujeme-li možné kvantové stavy elektronům ve víceelektronových atomech, musíme se řídit Pauliho vylučovacím principem z čl. 41.7, který požaduje, aby žádné dva elektrony v atomu neměly stejný soubor kvantových čísel n, l, m_l a m_s . Pokud by tento důležitý princip neplatil, mohly by *všechny* elektrony v atomu přeskočit do stavu atomu s nejnižší energií, a to by znemožnilo jakékoli chemické pochody u atomů a molekul, a tedy i všechny biochemické pochody. Na příkladu atomů několika prvků si vyzkoušíme, jak se Pauliho vylučovací princip uplatňuje při vytváření periodické soustavy prvků (dodatek G).

Neon

Atom neonu má 10 elektronů. Pouze dva z nich jsou na nejnižší energiové hladině — v podslupce $1s$. Oba tyto elektrony mají $n = 1, l = 0, m_l = 0$, ale jeden z nich má $m_s = \frac{1}{2}$ a druhý $m_s = -\frac{1}{2}$. Podslupka $1s$ má podle tab. 41.1 celkem $2(2l + 1) = 2$ stavy. Protože tato podslupka obsahuje všechny elektrony dovolené Pauliho vylučovacím principem, říkáme o ní, že je **uzavřená**.

Dva ze zbývajících osmi elektronů jsou v podslupce s další nejnižší energií — tj. v podslupce $2s$. Posledních šest elektronů pak právě zaplní podslupku $2p$, která pro $l = 1$ má celkem $2(2l + 1) = 6$ stavů.

V uzavřené podslupce lze najít všechny dovolené průměty orbitálního momentu hybnosti $\mathbf{L}$ do osy z . Jak se můžeme přesvědčit na obr. 41.5, tyto průměty se pro podslupku jako celek vyruší. Ke každému průmětu do kladného směru osy z existuje odpovídající průmět stejné velikosti do záporného směru osy z . Podobně se vyruší průměty spinových momentů hybnosti do osy z . Uzavřená podslupka tedy má nulový moment hybnosti i magnetický moment. Neon se svými třemi uzavřenými podslupkami ($1s, 2s, 2p$) nemá žádné *slabě vázané elektrony*, které by vytvářely chemickou vazbu s ostatními atomy. Neon, podobně jako ostatní

vzácné plyny ležící v pravém sloupci periodické soustavy prvků, je chemicky netečný (inertní).

Sodík

Hned za neonem najdeme v periodické soustavě sodík s 11 elektrony. Deset z nich tvoří uzavřené „jádro“ podobné neonu, které, jak jsme již poznali, má celkový moment hybnosti nulový. Zbývající elektron je daleko od tohoto inertního jádra v nejbližší nezaplňené podslupce 3s. Tento **valenční elektron** je ve stavu $l = 0$ (tj. v s stavu), proto je výsledný moment hybnosti a magnetický dipólový moment sodíkového atomu zcela určen spinem tohoto jediného elektronu.

Sodík snadno reaguje s atomy, které mají vhodný neobsazený stav („díru“), a tu může zaplnit slabě vázaný valenční elektron sodíku. Sodík, podobně jako ostatní **alkalické kovy** nacházející se v levém sloupci periodické soustavy prvků, je chemicky aktivní.

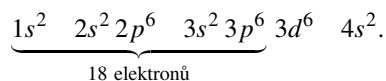
Chlor

Atom chloru má 17 elektronů, 10 z nich tvoří uzavřené neonu podobné jádro a 7 elektronů je navíc. Dva z nich zaplňují podslupku 3s a zbylých pět patří do podslupky 3p, která je v pořadí další s nejmenší energií. Tato podslupka s $l = 1$ může obsahovat až $2(2l + 1) = 6$ elektronů. K jejímu zaplnění chybí jeden elektron, takže je v ní volné místo, „díra“.

Chlor velmi snadno interaguje s atomy, které mají valenční elektron, který by mohl tuto díru zaplnit. Například chlorid sodný (NaCl) je velmi stabilní sloučenina. Chlor, podobně jako ostatní **halogeny** nacházející se ve sloupci 17 periodické soustavy prvků, je chemicky aktivní.

Železo

Uspořádání 26 elektronů v atomu železa může být vyjádřeno v tomto tvaru



Podslupky jsou vyjmenovávány podle číselného pořadí a počet elektronů v odpovídající slupce je zvykem psát jako horní index. Z tab. 41.1 víme, že podslupka s může maximálně obsahovat 2 elektrony, p podslupka 6 elektronů a podslupka d 10 elektronů. To znamená, že prvních 18 vyznačených elektronů v atomu železa tvoří pět uzavřených podslupek. Ze zbývajících 8 elektronů je šest v podslupce 3d a dva jsou v podslupce 4s.

Poslední dva elektrony tedy nejsou v podslupce 3d, která může obsahovat až 10 elektronů, protože atom s elektronovou konfigurací $3d^6 4s^2$ má celkovou energii nižší, než by tomu bylo v případě konfigurace $3d^8$. Kdyby měl atom železa 8 elektronů v podslupce 3d (místo 6), rychle by přešel do stavu s konfigurací $3d^6 4s^2$ za současné emise elektromagnetického záření. Tento příklad ukazuje, že kromě nejjednodušších prvků se jednotlivé elektronové stavy v atomech *nezaplní* v pořadí, které by nám připadalo nejpřirozenější.

PŘÍKLAD 41.4

Určete počet prvků v šesti vodorovných řádcích periodické soustavy prvků pomocí maximálního možného počtu elektronů v jednotlivých podslupkách.

ŘEŠENÍ: Počty prvků v prvních šesti řádcích periodické soustavy prvků jsou 2, 8, 8, 18, 18 a 32. Zaplnění podslupek závisí pouze na hodnotě kvantového čísla l a je rovno $2(2l + 1)$. Z toho plyne

ORBITÁLNÍ KVANTOVÉ ČÍSLO l	POČET STAVŮ V PODSLUPCE $2(2l + 1)$
0	2
1	6
2	10
3	14

Pro každý z řádků můžeme zaplnění podslupek vyjádřit takto:

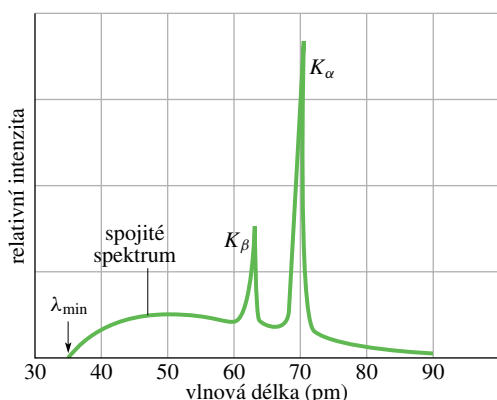
ČÍSLO PERIODY	POČET PRVKŮ V PERIODĚ	CELKOVÝ POČET MOŽNÝCH STAVŮ V PODSLUPCE
1	2	2
2, 3	8	$2 + 6 = 8$
4, 5	18	$2 + 6 + 10 = 18$
6	32	$2 + 6 + 10 + 14 = 32$

41.10 RENTGENOVÉ ZÁŘENÍ A ZAŘAZENÍ PRVKŮ

Je-li terč z pevné látky, například z mědi nebo wolframu, bombardován svazkem elektronů o kinetické energii řádově tisíců elektronvoltů, emituje elektromagnetické záření zvané rentgenové záření (anglicky X-rays). Toto záření — jehož využití v lékařství i průmyslu je dobře známé a velmi rozšířené — nám může také mnoho říci o atomech, které je emitují nebo absorbují.

Na obr. 41.15 je spektrum závislosti intenzity rentgenového záření na jeho vlnové délce pro molybdenový terč

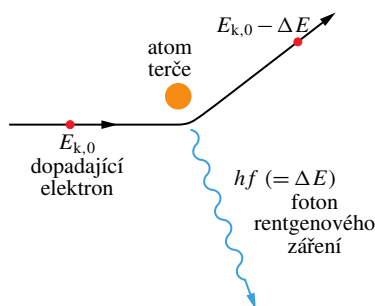
bombardovaný elektrony o energii 35 keV. Vidíme, že ze širokého pásu spojitěho spektra vyčnívají dva úzké píky pro dvě ostře definované hodnoty vlnových délek. Spojité spektrum a píky vznikají odlišným způsobem, a proto je probereme odděleně.



Obr. 41.15 Závislost intenzity rentgenového záření na vlnové délce při dopadu elektronů o energii 35 keV na molybdenový terč. Spojité spektrum a ostré píky vznikají různými mechanismy.

Spojité rentgenové spektrum (brzdné záření)

Budeme se nejdříve věnovat spojitému spektru na obrázku 41.15 a nebudeme si zatím všimnout obou nápadných píků, které z něj vyčnívají. Předpokládejme, že se elektron o počáteční kinetické energii $E_{k,0}$ srazí (interaguje) s jedním z atomů terče, jak je naznačeno na obr. 41.16. Elektron může ztratit část své energie ΔE a ta se může přeměnit ve foton, který je vyzářen z místa srážky. (Energii, kterou při srážce převezme atom, můžeme zanedbat; je malá, protože atom má relativně velkou hmotnost.)



Obr. 41.16 Elektron o kinetické energii $E_{k,0}$ procházející v blízkosti atomu terče může vytvořit foton rentgenového záření a přitom ztratit část své původní energie. Tímto způsobem vzniká spojité spektrum (brzdné záření).

Rozptýlený elektron na obr. 41.16 má nyní energii menší než $E_{k,0}$; může se znovu srazit s dalším atomem terče a vytvořit druhý foton, jehož energie se může lišit od hodnoty energie prvního fotonu, který vznikl v průběhu první srážky. Tyto elektronové srážky mohou pokračovat, dokud se elektron nezabrzdí. Všechny fotony vznikající při těchto srážkách vytvářejí spojitou část rentgenového spektra, v české a německé literatuře často nazývanou **brzdné záření**.

Významným rysem spektra z obr. 41.15 je existence ostře definované hodnoty **prahové vlnové délky** $\lambda_{\min}$. Kratší vlnové délky, než je tato hodnota, nejsou ve spojitěm spektru zastoupeny. Tato minimální hodnota vlnové délky odpovídá jedině srážce elektronu s atomem terče, při které elektron ztratí *veškerou* svou počáteční energii $E_{k,0}$. Všechna tato energie se přemění v energii jediného fotonu, jehož vlnová délka — minimální možná vlnová délka vznikajícího rentgenového záření — je určena vztahem

$$E_{k,0} = hf = \frac{hc}{\lambda_{\min}},$$

odkud plyne

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{E_{k,0}} \quad (\text{prahová vlnová délka}). \quad (41.15)$$

Hodnota prahové vlnové délky vůbec nezávisí na materiálu terče. Použijeme-li místo molybdenového terče měděný, změní se všechny rysy spektra rentgenového záření z obr. 41.15 *kromě* hodnoty prahové vlnové délky.

KONTROLA 2: Bude se hodnota prahové vlnové délky rentgenového záření $\lambda_{\min}$ zvyšovat, snižovat, nebo zůstane stejná, když (a) zvýšíme kinetickou energii elektronů dopadajících na terč, (b) elektrony budou namísto masivního terče dopadat na tenkou folii stejného materiálu, (c) zaměníme terč za jiný, složený z atomů s vyšším atomovým číslem?

PŘÍKLAD 41.5

Svazek elektronů o energii 35,0 keV dopadá na molybdenový terč a vytváří tak rentgenové záření, jehož spektrum je znázorněno na obr. 41.15.

(a) Jaká je prahová vlnová délka?

ŘEŠENÍ: Z rov. (41.15) plyne

$$\begin{aligned} \lambda_{\min} &= \frac{hc}{E_{k,0}} = \frac{(4,14 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})}{(35,0 \cdot 10^3 \text{ eV})} = \\ &= 3,55 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 35,5 \text{ pm}. \end{aligned} \quad (\text{Odpověď})$$

(b) Předpokládejte, že jeden z dopadajících elektronů postupně ztratí část své energie, takže namísto 35,0 keV má energii 20,0 keV. Jaká je hodnota vlnové délky λ fotonu, který vznikne při jediné přímé srážce tohoto elektronu s atomem terče, při níž elektron ztratí celou zbývající energii?

ŘEŠENÍ: Počítáme jako v případě (a), pouze dosadíme místo 35,0 keV hodnotu 20,0 keV. Dostaneme

$$\lambda_{\min} = 62,1 \text{ pm.} \quad (\text{Odpověď})$$

Hodnota této vlnové délky je větší než minimální vlnová délka spočtená v případě (a), neboť energie elektronu je menší.

Charakteristické rentgenové záření

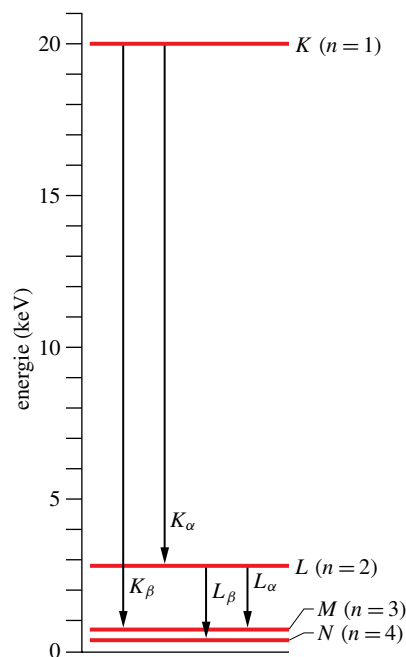
Obraťme pozornost ke dvěma píkům na obr. 41.15, označeným jako K_α a K_β . Tyto dva píky a další, které jsou už mimo oblast vlnových délek na obr. 41.15, tvoří tzv. **charakteristické rentgenové spektrum** materiálu terče.

Píky vznikají procesem složeným ze dvou částí.

(1) Elektron s vysokou energií narazí do atomu terče a při srážce vyrazí jeden z vnitřních elektronů atomu terče (s nízkou hodnotou n). Je-li tento vnitřní elektron ze slupky $s = 1$ (historicky nazývaná K -slupka), vznikne v této slupce *díra*. (2) Elektron z jedné ze slupek vzdálenějších od jádra přejde na K -slupku a tuto díru zaplní. Při tomto přechodu atom emituje foton charakteristického rentgenového záření. Přechází-li elektron ze slupky $s = 2$ (nazývané L -slupka), aby zaplnil díru v K -slupce, emitované záření je čára K_α na obr. 41.15; přechází-li ze slupky $s = 3$ (M -slupka), vytváří čáry K_β atd. Díry ve slupkách L nebo M budou zaplněny elektrony z ještě vzdálenějších slupek.

Při studiu rentgenového záření bývá zpravidla výhodnější sledovat díru, vytvořenou v hloubce „elektronového oblaku“ atomu, než zaznamenávat změny v kvantových stavech elektronů, které ji vyplní. Na obr. 41.17 je tato situace znázorněna; jedná se o energiový diagram molybdenu, jehož spektrum bylo na obr. 41.15. Energie $E = 0$ představuje neutrální atom v základním stavu. Hladina označená K (pro $E = 20 \text{ keV}$) představuje energii atomu molybdenu s dírou v K -slupce. Obdobně hladina označená L (s energií $E = 2,7 \text{ keV}$) představuje molybdenový atom s dírou v L -slupce atd.

Dva píky označené na obr. 41.15 jsou způsobeny přechody označenými K_α a K_β na obr. 41.17. Například spektrální čára K_α vzniká, když elektron z L -slupky zaplní díru v K -slupce. Na obr. 41.17 tomuto procesu odpovídá přechod díry z vyšší energiové hladiny K na nižší hladinu L .



Obr. 41.17 Zjednodušený diagram hladin energie atomu molybdenu znázorňuje přechody (děry, nikoli elektronů), odpovídající vzniku některé z charakteristických čar rentgenového spektra tohoto atomu. Každá z vodorovných čar odpovídá energii atomu s dírou (tj. scházejícím elektronem) v označené slupce.

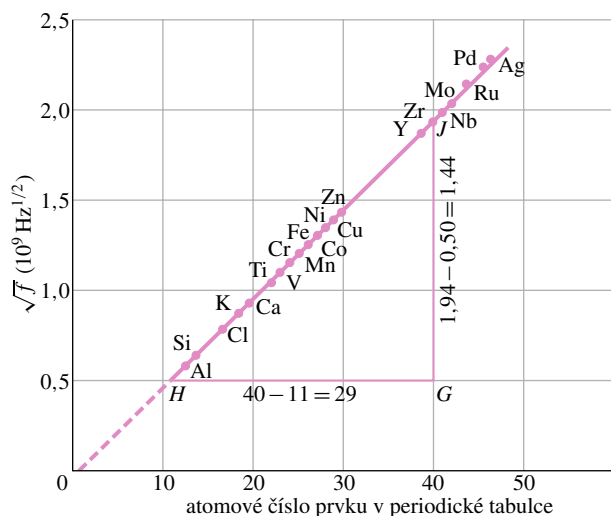
Zařazení prvků

V roce 1913 studoval anglický fyzik H. G. J. Moseley charakteristické rentgenové záření tolika prvků, kolik jich mohl najít — a našel jich 38 — tak, že terče z těchto prvků bombardoval elektrony ve vakuovém zařízení, které sám navrhl. Jednotlivé terče Moseley umístil na vozičku taženém na hedvábném vlasci a postupně je vystavil elektronovému svazku. Vlnovou délku vzniklého rentgenového záření měřil difrakcí na krystalu, popsanou v čl. 37.9.

Moseley pak hledal (a našel) pravidelnosti v takto získaných spektrech jednotlivých prvků periodické tabulky. Vynesl pro danou spektrální čáru, například K_α , závislost druhé odmocniny z frekvence f této čáry na poloze prvku v periodické tabulce a dostal přímku. Část z rozsáhlého souboru experimentálních dat je uvedena na obr. 41.18. Moseley učinil následující závěr:

Máme zde důkaz, že v atomu existuje základní veličina, která narůstá o stejnou hodnotu, přecházíme-li od jednoho prvku k následujícímu. Touto veličinou může být pouze náboj jádra.

Díky Moseleyho pracím se charakteristické rentgenové spektrum stalo všeobecně uznávanou charakteristikou prvku, umožňující vyřešit mnohé ze záhad v periodické tabulce. Do roku 1913 byla poloha prvku v periodické tabulce



Obr. 41.18 Moseleyho graf spektrálních čar K_α charakteristického rentgenového záření 21 prvků. Frekvence je vypočtena z měřené vlnové délky. Měření vyznačená v trojúhelníku HGJ jsou použita v př. 41.7 k výpočtu směrnice této lineární závislosti.

určena jeho atomovou *hmotností*, přestože existovalo několik dvojic, kdy muselo dojít k záměně pořadí prvků, aby to odpovídalo jejich chemickým vlastnostem. Moseley prokázal, že náboj jádra (tj. *atomové číslo* Z) určuje správné pořadí prvků v periodické tabulce.

V roce 1913 bylo v periodické tabulce několik prázdných míst a byl znám překvapující počet kandidátů na nové prvky, které je měly zaplnit. Spektra rentgenového záření však umožnila rozhodující test těchto kandidátů. *Lanthanoidy*, prvky vzácných zemin, byly vzhledem ke svým velmi podobným chemickým vlastnostem řazeny velmi nepřesně. Jakmile byla Moseleyho práce publikována, bylo možno tyto prvky náležitě zařadit. Později mohly být také jednoznačně zařazeny prvky za atomem uranu, pokud byly získány v dostatečném množství pro studium jejich rentgenových spekter.

Není těžké pochopit, proč charakteristické rentgenové spektrum vykazuje pro každý prvek takové pozoruhodné pravidelnosti, zatímco například optické spektrum nikoli: klíč k určování prvku spočívá ve stanovení náboje jeho jádra. Například zlato je zlatem proto, že jeho atomy mají jádra o náboji $+79e$ (to znamená $Z = 79$). O jeden elementární náboj v jádře více má rtuť; o jeden méně má platina. K -elektrony, které se významnou měrou podílejí na vzniku rentgenového spektra, jsou velmi blízko jádra a jsou tak velmi citlivé na jeho náboj. Na druhé straně optické spektrum je způsobeno přechody vnějších elektronů, které jsou od jádra odstíněny zbývajícími elektrony atomu, a proto *nejsou* citlivé na náboj jádra.

Objasnění Moseleyho grafu

Moseleyho experimentální data, jejichž část je uvedena v obr. 41.18, mohou být přímo použita k zařazení jednotlivých prvků na jejich správná místa v periodické tabulce. To šlo dokonce i tehdy, když nebylo známé teoretické vysvětlení Moseleyho grafu. My je však máme.

Podle rov. (40.18) je energie vodíkového atomu

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad \text{pro } n = 1, 2, 3, \dots \quad (41.16)$$

Vezmeme nyní jeden ze dvou vnitřních elektronů v K -slupce nějakého víceelektronového atomu. Vzhledem k přítomnosti druhého K -elektronu náš první elektron „vidí“ efektivní náboj jádra, který je přibližně $(Z - 1)e$, kde e je velikost elementárního náboje a Z je atomové číslo prvku. Člen e^4 v rov. (41.16) je dán součinem e^2 (čtverce náboje jádra) a $(-e)^2$ (čtverce náboje elektronu). Proto pro víceelektronový atom můžeme nahradit člen e^4 v rov. (41.16) členem $(Z - 1)^2 e^2 \cdot (-e)^2$ neboli $e^4 (Z - 1)^2$. Obdržíme

$$E_n = -\frac{(13,6 \text{ eV})(Z - 1)^2}{n^2}. \quad (41.17)$$

Viděli jsme, že foton K_α rentgenového záření (o energii hf) vznikne, přejde-li elektron ze slupky L ($n = 2$ a energie E_2) do slupky K ($n = 1$ a energie E_1). Z rov. (41.17) tedy pro energii emitovaného fotonu dostaneme

$$\begin{aligned} hf &= E_2 - E_1 = \\ &= \frac{-(13,6 \text{ eV})(Z - 1)^2}{2^2} - \frac{-(13,6 \text{ eV})(Z - 1)^2}{1^2} = \\ &= (10,2 \text{ eV})(Z - 1)^2. \end{aligned}$$

Frekvence f fotonu K_α čáry je

$$\begin{aligned} f &= \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{(10,2 \text{ eV})(Z - 1)^2}{(4,14 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s})} = \\ &= (2,46 \cdot 10^{15} \text{ Hz})(Z - 1)^2. \end{aligned} \quad (41.18)$$

Odmocníme-li obě strany rovnice, dostaneme

$$\sqrt{f} = CZ - C, \quad (41.19)$$

kde C je konstanta. Rov. (41.19) je rovnice přímky. Říká nám, že vynásíme-li druhou odmocninu frekvence fotonu spektrální čáry K_α v závislosti na atomovém čísle Z , měli bychom získat přímku. Jak ukazuje graf v obr. 41.18, je to přesně ta závislost, kterou objevil Moseley.

KONTROLA 3: Čára K_α rentgenového záření z kobaltového terče ($Z = 27$) má vlnovou délku 179 pm. Je vlnová délka rentgenového záření K_α čáry niklu ($Z = 28$) delší, nebo kratší?

PŘÍKLAD 41.6

Kobaltový terč bombardovaný elektrony vyzařuje rentgenové záření, jehož charakteristické spektrum měříme. Lze v něm rozeznat ještě jedno slabší spektrum, pocházející od nečistoty. Odpovídající vlnové délky jsou 178,9 pm (kobalt) a 143,5 pm (nečistota). O jakou nečistotu se jedná?

ŘEŠENÍ: K výpočtu použijme rov. (41.19) jednak pro kobalt (Co) a jednak pro nečistotu (X). Dosazením $f = c/\lambda$ dostaneme

$$\sqrt{\frac{c}{\lambda_{\text{Co}}}} = C Z_{\text{Co}} - C \quad \text{a} \quad \sqrt{\frac{c}{\lambda_{\text{X}}}} = C Z_{\text{X}} - C.$$

Dělení druhé rovnice první rovnicí dává

$$\sqrt{\frac{\lambda_{\text{Co}}}{\lambda_{\text{X}}}} = \frac{Z_{\text{X}} - 1}{Z_{\text{Co}} - 1}.$$

Dosazením známých dat a hodnoty $Z_{\text{Co}} = 27$ obdržíme

$$\sqrt{\frac{178,9 \text{ pm}}{143,5 \text{ pm}}} = \frac{Z_{\text{X}} - 1}{27 - 1}.$$

Neznámá je pak rovna

$$Z_{\text{X}} = 30,0. \quad (\text{Odpověď})$$

Nahlédnutím do periodické tabulky určíme, že nečistotou je zinek.

PŘÍKLAD 41.7

(a) Stanovte hodnotu konstanty C v rov. (41.19).

ŘEŠENÍ: Porovnáním rov. (41.18) a (41.19) zjistíme, že

$$C = \sqrt{(2,46 \cdot 10^{15} \text{ Hz})} = 4,96 \cdot 10^7 \text{ Hz}^{1/2}. \quad (\text{Odpověď})$$

(b) Pomocí Moseleyho grafu z obr. 41.18 ověřte, že C odpovídá změřené směrnici přímk.

ŘEŠENÍ: Změříme-li úsečky $|HG|$ a $|GJ|$ v obr. 41.18, dostaneme

$$C = \frac{|GJ|}{|HG|} = \frac{(1,94 - 0,50) \cdot 10^9 \text{ Hz}^{1/2}}{40 - 11} = 4,96 \cdot 10^7 \text{ Hz}^{1/2}. \quad (\text{Odpověď})$$

Tyto dva výsledky plně souhlasí. Souhlas pro jiné čáry než K_{α} už není tak dobrý; pro ně musíme lépe započítat vliv okolních elektronů.

41.11 LASERY A JEJICH SVĚTLO

Na sklonku čtyřicátých let a na začátku šedesátých let obohatila kvantová mechanika moderní techniku dvěma mimořádnými příspěvky: **tranzistorem**, který umožnil počítačovou revoluci, a **laserem**. Laserové světlo je obdobně jako světlo obyčejné žárovky emitováno tehdy, přechází-li atom z kvantového stavu s vyšší energií do kvantového stavu s nižší energií. V laserech však — na rozdíl od jiných zdrojů světla — atomy vyzařují společně a vytvářejí tak světlo neobyčejných vlastností:

1. Laserové světlo je vysoce monochromatické. Světlo obyčejné žárovky pokrývá spojitou oblast vlnových délek a jistě není monochromatické. Spektrální čáry z neonové zářivky jsou monochromatické v poměru $1 : 10^6$. Avšak v případě laserů je ostrost čáry mnohonásobně vyšší — může dosahovat hodnot až $1 : 10^{15}$.

2. Laserové světlo je vysoce koherentní. Jednotlivé vlny (vlnová klubka) laserového světla mohou být několik stovek kilometrů dlouhé. Pokud dva rozdělené svazky, které prošly po oddělených drahách takové vzdálenosti, se opět spojí, „pamatují si“ vše o svém společném původu a mohou vytvářet interferenční proužky. Odpovídající *koherentní délka* vlnových klubek obyčejné žárovky je zpravidla menší než jeden metr.

3. Laserové světlo je vysoce směrové. Laserový svazek má malou rozbíhavost; odchyluje se od přesné rovnoběžnosti pouze v důsledku difrakce na výstupní cloně laseru. Například laserový pulz pro měření vzdálenosti Země–Měsíc vytváří na povrchu Měsíce stopu, jejíž průměr je pouhá jedna miliontina průměru Měsíce. Světlo z obyčejné žárovky může rovněž pomocí čoček vytvořit téměř rovnoběžný svazek, ale jeho rozbíhavost je mnohem větší než svazku z laseru. Každý bod vlákna žárovky totiž vyzařuje svůj vlastní, oddělený svazek a úhlová rozbíhavost takto složeného celkového světelného svazku je dána geometrickými rozměry vlákna.

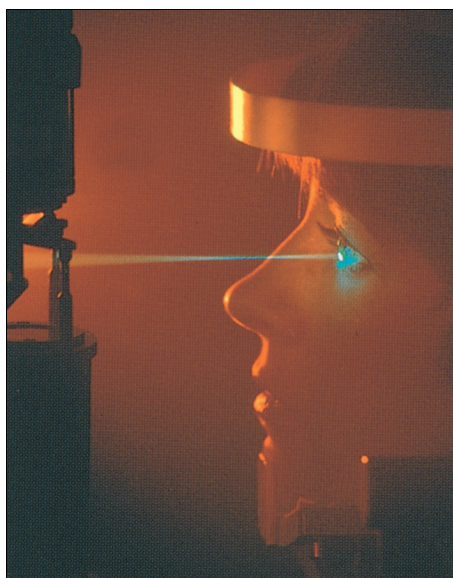
4. Laserové světlo lze ostře zfokusovat. Pokud dva světelné paprsky přenášejí stejné množství energie, pak ten z nich, který může být zaostřen do menší stopy, bude mít v této stopě větší intenzitu. Laserový svazek může být fokusován do stopy tak malé, že v ní lze snadno dosáhnout intenzity 10^{17} W/cm^2 . Naproti tomu kyslíko-acetylenový plamen pro svařování dosahuje intenzit jen kolem 10^3 W/cm^2 .

Mnohostranné využití laserů

Nejmenší lasery, používané k přenosu hlasu a dat optickými vlákny, mají jako aktivní prvek krystal polovodiče rozměru špendlíkové hlavičky. Ačkoli jsou malé, přesto generují

světlo o výkonu kolem 200 mW. Největší lasery, používané při výzkumech jaderné fúze, v astronomii a ve vojenských aplikacích, zaplňují velké budovy. Největší z nich generuje krátký pulz laserového světla o výkonu 10^{14} W. To je o dva řády více, než je celková kapacita výroby elektřiny v USA. Aby nedošlo v průběhu pulzu k výpadku elektrického proudu v celé zemi, je energie potřebná k jeho uskutečnění akumulována po delší dobu mezi jednotlivými pulzy.

Lasery se používají například při čtení čárových kódů v obchodech, při výrobě a čtení kompaktních disků, při různých operacích (fotografie v úvodu k této kapitole a na obr. 41.19), k vyměřování, pro stříhání látek v oděvním průmyslu (vrstva několika stovek látek současně), při svařování karoserií aut nebo při výrobě hologramů.



Obr. 41.19 Laserový paprsek je vyslán do oka pacientky s cukrovkou, aby uzavřel cévky na její sítnici.

41.12 JAK PRACUJÍ LASERY

Slovo „laser“ je zkratka pro „light amplification by the stimulated emission of radiation“ (zesilování světla stimulovanou emisí záření), takže bychom neměli být překvapeni tím, že klíčem k činnosti laseru je **stimulovaná emise**. Einstein tento pojem zavedl již v roce 1917. I když si svět musel počkat až do roku 1960, kdy byl první laser uveden do provozu, základní práce na jeho vývoji se datují o několik desetiletí dříve.

Předpokládejme, že se izolovaný atom může nacházet buď ve stavu s nejnižší energií E_0 (jeho základní stav), nebo ve stavu s vyšší energií E_x . Uvedme si tři možné způsoby,

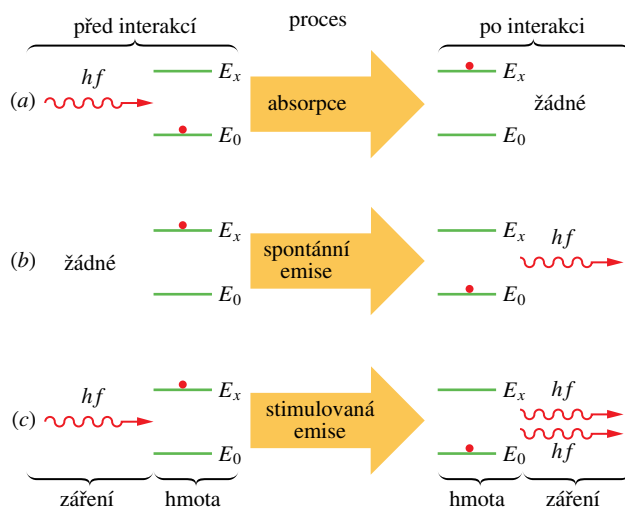
jakými se atom může dostat z jednoho z těchto stavů do stavu druhého:

1. Absorpce. Obr. 41.20a ukazuje atom v základním stavu. Je-li tento atom umístěn do vnějšího elektromagnetického pole o frekvenci f , může z tohoto pole absorbovat určité množství energie hf a dostat se do vyššího energetického stavu. Ze zákona zachování energie plyne

$$hf = E_x - E_0. \quad (41.20)$$

Tento proces nazýváme **absorpce**.

2. Spontánní emise. Na obr. 41.20b je atom v excitovaném stavu a vnější pole je nulové. Po nějaké době atom *samovolně* přejde do svého základního stavu za současné emise fotonu o energii hf . Tento proces nazýváme **spontánní emise** — *spontánní* proto, že tato událost není spouštěna žádným vnějším vlivem. Tímto způsobem se například vytváří světlo v obyčejné žárovce.



Obr. 41.20 Interakce záření s hmotou v procesu (a) absorpce, (b) spontánní emise a (c) stimulované emise. Atom (tj. hmota) je znázorněn jako červená tečka; atom se nachází buď ve svém nižším kvantovém stavu s energií E_0 , nebo ve vyšším stavu s energií E_x . V případě (a) atom absorbuje foton o energii hf od okolní světelné vlny. V případě (b) emituje světelnou vlnu o energii hf . V případě (c) způsobí procházející vlna, jejíž foton má energii hf , že atom emituje foton o téže energii, a tím zvýší energii světelné vlny.

Střední doba života atomu v excitovaném stavu, tedy doba, než se uskuteční spontánní emise, je obvykle kolem 10^{-8} s. Pro některé excitované stavy však tato střední doba může být až 10^5 krát delší. Tyto stavy s dlouhou dobou života nazýváme **metastabilní**; ty pak hrají důležitou roli při činnosti laseru.

3. Stimulovaná emise. Na obr. 41.20c je atom opět v excitovaném stavu, ale tentokrát je ozářen světlem o frekvenci dané rov. (41.20). Foton o energii hf může stimulovat atom, aby přešel do svého základního stavu. V tomto procesu atom emituje další foton, jehož energie je rovněž hf . Tento proces nazýváme **stimulovaná emise** — *stimulovaná* proto, že tato událost je spouštěna vnějším fotonem.

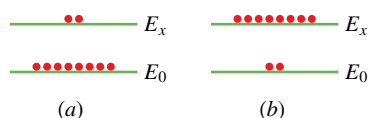
Emitovaný foton z obr. 41.20c je v každém ohledu identický se stimulujícím fotonem. Vlna spojená s tímto fotonem má stejnou energii, fázi, polarizaci a směr šíření. Za vhodných podmínek lze spustit řetězovou reakci podobných stimulujících procesů jediným počátečním fotonem o správné frekvenci. Právě tímto způsobem je vytvářeno laserové světlo.

Poznamenejme, že fotony ve svazku laserového světla jsou všechny ve stejném kvantovém stavu. Fotony se na rozdíl od elektronů *neřídí* Pauliho vylučovacím principem. Fotony se „rády“ hromadí ve stejném kvantovém stavu; elektronům je to zakázáno.

Obr. 41.20c ukazuje stimulovanou emisi jednoho atomu. Předpokládejme nyní, že vzorek obsahuje velký počet atomů v termodynamické rovnováze při teplotě T . Dříve, než je jakékoli záření na vzorek nasměrováno, existuje v tomto vzorku N_0 atomů ve svém základním stavu a N_x atomů ve stavu s vyšší energií E_x . Ludwig Boltzmann ukázal, že počet N_x lze pomocí N_0 vyjádřit ve tvaru

$$N_x = N_0 e^{-(E_x - E_0)/kT}, \quad (41.21)$$

kde k je Boltzmannova konstanta. Tato rovnice se snadno zdůvodní. Veličina kT odpovídá střední kinetické energii atomu o teplotě T . Čím vyšší je teplota, tím více atomů bude tepelně vybudeno (srážkami s ostatními atomy) do stavů s vyššími energiemi. Poněvadž $E_x > E_0$, pak z rov. (41.21) vyplývá, že $N_x < N_0$. To znamená, že atomů v excitovaném stavu bude vždy méně, než v základním stavu. Nastane to, co lze očekávat, když jsou atomy buzeny pouze srážkami při tepelném pohybu. Tato situace je znázorněna na obr. 41.21a.



Obr. 41.21 (a) Rovnovážné rozdělení atomů v základním stavu E_0 a excitovaném stavu E_x způsobené pouze srážkami při tepelném pohybu. (b) Inverze populace, získaná speciálními metodami; tato inverze populace je pro činnost laseru důležitá.

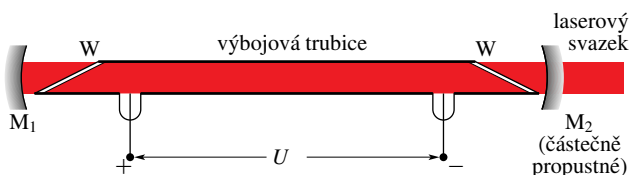
Zaplavíme-li nyní atomy na obr. 41.21a fotony o energii $E_x - E_0$, budou tyto fotony zanikat, když je absorbují atomy v základním stavu. Nové fotony budou převážně vznikat stimulovanou emisí při přechodu atomů z excito-

vaného do základního stavu. Einstein ukázal, že pravděpodobnosti obou procesů jsou shodné. Vzhledem k tomu, že se více atomů nachází v základním stavu, bude převažovat absorpce fotonů.

Abychom vytvořili laserové světlo, musí být více fotonů emitováno než absorbováno; to znamená, že musíme mít situaci, kdy stimulovaná emise převažuje. Proto musíme začít s více atomy v excitovaném stavu jako na obr. 41.21b. Poněvadž se však toto **převrácení (inverze) populace** neshoduje s obvyklou termodynamickou rovnováhou, musíme vymyslet způsob, jak toto převrácení populace dosáhnout a jak je i udržet.

Helium-neonový plynový laser

Na obr. 41.22 je znázorněn typ laseru, který dnes běžně najdeme i ve studentských laboratořích. V roce 1961 ho vyvinul Ali Javan se svými spolupracovníky. Skleněná výbojka je naplněna směsí helia a neonu (v poměru 20 : 80). Plynň neon je aktivní médium, které emituje laserové světlo.

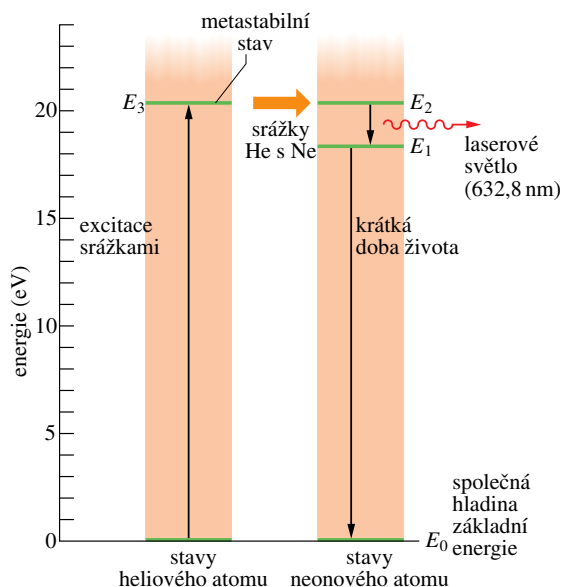


Obr. 41.22 Části helium-neonového laseru. Přiložené stejnosměrné napětí U způsobí, že výbojkou, která je naplněna plynou směsí helia a neonu, protéká proud elektronů. Elektrony se srážejí s atomy helia, ty se srážejí s atomy neonu a atomy neonu emitují světlo ve směru osy trubice. Světlo prochází průhlednými okénky W na koncích trubice a odráží se zrcadly M_1 a M_2 zpět do trubice; tak se neustále zvyšuje počet emitujících atomů neonu. Zrcadlo M_2 je částečně propustné, takže malá část dopadajícího světla jím prochází a vytváří tak laserový svazek.

Obr. 41.23 ukazuje zjednodušený energiový diagram obou atomů. K nabuzení co nejvíce atomů He do metastabilního stavu E_3 se využívají srážky atomů helia s proudem elektronů, který protéká trubicí.

Energie stavu E_3 (20,61 eV) atomu helia je velmi blízká hodnotě energie stavu E_2 (20,66 eV) atomu neonu. Srazí-li se tedy atom helia v metastabilním stavu (E_3) s atomem neonu v základním stavu (E_0), bude často excitační energie heliového atomu předána atomu neonu, který tak přejde do stavu s energií E_2 . Tímto způsobem lze dosáhnout toho, že energiová hladina E_2 atomu neonu na obr. 41.23 bude obsazena více, než hladina E_1 .

Inverzi populace poměrně snadno získáme a udržíme proto, že (1) na počátku nejsou v podstatě žádné atomy neonu ve stavu s energií E_1 , (2) metastabilita energiové



Obr. 41.23 Čtyři podstatné energiové hladiny helium-neonového plynového laseru. K emisi laserového fotonu dojde při přechodu mezi hladinami E_2 a E_1 atomu neonu, když je více atomů neonu ve stavu s energií E_2 než ve stavu s E_1 .

hladiny E_3 atomů helia zajišťuje dostatečný počet atomů neonu ve stavu s energií E_2 a (3) atomy neonu z energiové hladiny E_1 rychle přecházejí (přes nevyznačené přechodové hladiny) do základního stavu neonu s energií E_0 .

Předpokládáme, že dojde ke spontánní emisi jediného fotonu při přechodu atomu neonu ze stavu s energií E_2 do stavu o energii E_1 . Tento foton může spustit stimulovanou emisi další foton a ten spustí opět novou emisi fotonu. Vlivem takto spuštěné řetězové reakce se velmi rychle vytvoří koherentní svazek červeného laserového světla, pohybujícího se rovnoběžně s osou trubice. Toto světlo o vlnové délce 632,8 nm se může šířit mnohokrát tam a zpět trubicí tak, že se odráží od zrcadel M_1 a M_2 podle obr. 41.22 a získává stimulovanou emisi další a další fotony při každém průchodu trubicí.

Zrcadlo M_1 je pokryto vrstvou, která odráží světlo této vlnové délky téměř dokonale. Zrcadlo M_2 je vyrobeno tak, že při každém odrazu malou část laserového světla propouští, a odtud pak vystupuje použitelný svazek laserového světla.

KONTROLA 4: Vlnová délka světla z laseru A (helium-neonový plynový laser) je 632,8 nm, vlnová délka světla z CO_2 plynového laseru B je 10,6 μm . Laser C (gallium arsenidový polovodičový laser) vytváří světlo o vlnové délce 840 nm. Seřadte sestupně tyto lasery podle velikosti rozdílu energií kvantových stavů umožňujících činnost laseru.

PŘÍKLAD 41.8

V helium-neonovém laseru z obr. 41.22 dojde k vyzařování laserového světla při přechodu mezi dvěma excitovanými energiovými hladinami atomu neonu. V mnoha laserech však dochází k emisi při přechodu mezi hladinou excitovanou a hladinou základní energie, jak je naznačeno na obr. 41.21.

(a) Uvažujte takový laser, který emituje na vlnové délce $\lambda = 550 \text{ nm}$. Kdybychom nevytvořili inverzi populace, jaký by byl poměr počtu atomů s energií E_x k počtu atomů s energií E_0 ?

ŘEŠENÍ: Z rov. (41.21) je tento poměr roven

$$N_x/N_0 = e^{-(E_x - E_0)/(kT)}. \quad (41.22)$$

Rozdíl mezi oběma energiovými hladinami je

$$\begin{aligned} E_x - E_0 &= hf = \frac{hc}{\lambda} = \\ &= \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})(3,00 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})}{(550 \cdot 10^{-9} \text{ m})(1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV})} = \\ &= 2,26 \text{ eV}. \end{aligned}$$

Střední kinetická energie kT tepelného pohybu při pokojové teplotě (300 K) je rovna

$$kT = (8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K})(300 \text{ K}) = 0,0259 \text{ eV}.$$

Dosazením obou výsledků do rov. (41.22) získáme

$$\begin{aligned} N_x/N_0 &= e^{-(2,26 \text{ eV})/(0,0259 \text{ eV})} = \\ &= e^{-87,26} \doteq 1,3 \cdot 10^{-38}. \quad (\text{Odpověď}) \end{aligned}$$

To je velmi malé číslo. Není ale nerozumné, protože atom, jehož střední energie tepelného pohybu je pouze 0,0259 eV, nebude příliš často při srážce udělovat energii 2,26 eV jinému atomu.

(b) Pro podmínky stejné jako v případě (a) určete, při jaké teplotě by byl poměr N_x/N_0 roven 1/2?

ŘEŠENÍ: Po dosazení do rov. (41.22) a logaritmování obou stran získáme rovnici pro T

$$\begin{aligned} T &= \frac{E_x - E_0}{k(\ln 2)} = \frac{(2,26 \text{ eV})}{(8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K})(\ln 2)} = \\ &= 38\,000 \text{ K}. \quad (\text{Odpověď}) \end{aligned}$$

To je teplota mnohem vyšší než na povrchu Slunce. Je však jasné, že pokud chceme invertovat populaci těchto dvou hladin, potřebujeme k tomu použít jiný mechanismus, neboť teplota, jakkoli vysoká, nemůže převrácení populace způsobit.

PŘEHLED & SHRNUÍ

Některé vlastnosti atomů

Energie atomů jsou kvantovány, tj. atomy mají jen určité hodnoty energií, které přísluší různým kvantovým stavům. Atom může přecházet mezi různými kvantovými stavy při emisi nebo absorpci fotonu. Frekvence f tohoto fotonu je dána *Bohrovou frekvenční podmínkou*:

$$hf = E_v - E_n, \quad (41.1)$$

kde E_v je vyšší a E_n nižší energie ze dvou kvantových stavů, mezi nimiž dojde k přechodu. Atomy mají rovněž kvantovány momenty hybnosti a magnetické dipólové momenty.

Momenty hybnosti a magnetické dipólové momenty

Elektron vázaný v atomu má *orbitální moment hybnosti* $\mathbf{L}$ a s ním spojený *orbitální magnetický dipólový moment* μ_{orb} . Jsou rovnoběžné a mají opačné směry. Velikost $\mathbf{L}$ je kvantována a její hodnoty jsou

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (41.2)$$

kde l je *orbitální kvantové číslo* (které může nabývat hodnot daných v tab. 41.1). Složka L_z je kvantována a měřitelná a nabývá hodnot

$$L_z = m_l \hbar, \quad (41.3)$$

kde m_l je *orbitální magnetické kvantové číslo* (které může nabývat hodnot daných v tab. 41.1).

Složka orbitálního magnetického dipólového momentu $\mu_{\text{orb},z}$ je kvantována a měřitelná a nabývá hodnot

$$\mu_{\text{orb},z} = -m_l \mu_B, \quad (41.4)$$

kde m_l je *orbitální magnetické kvantové číslo* a μ_B je *Bohrův magneton*

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}. \quad (41.5)$$

Elektron, vázaný nebo volný, má svůj vlastní *spinový moment hybnosti* (neboli *spin*) $\mathbf{S}$ a svůj vlastní *spinový magnetický dipólový moment* μ_s . Jsou rovnoběžné, ale mají opačný směr. Velikost $\mathbf{S}$ je dána

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad (41.6)$$

kde s je *spinové kvantové číslo* elektronu. Je vždy rovno $\frac{1}{2}$. Složka S_z spinu je kvantována a měřitelná a nabývá hodnot

$$S_z = m_s \hbar, \quad (41.7)$$

kde m_s je *spinové magnetické kvantové číslo* elektronu, které může být rovno $+\frac{1}{2}$, nebo $-\frac{1}{2}$. Složka $\mu_{s,z}$ je kvantována a měřitelná a může nabývat hodnot

$$\mu_{s,z} = -2m_s \mu_B. \quad (41.8)$$

Jaderná magnetická rezonance

Proton má svůj vlastní spinový moment hybnosti $\mathbf{S}$ a s ním spojený spinový magnetický dipólový moment μ *stejněho* směru jako $\mathbf{S}$. Umístíme-li proton do vnějšího magnetického pole $\mathbf{B}$, pak průmět μ_z do směru osy z definované směrem pole $\mathbf{B}$ může nabývat dvou kvantovaných orientací: souhlasně, nebo nesouhlasně rovnoběžné s $\mathbf{B}$. Příslušný energiový rozdíl mezi oběma orientacemi je roven $2\mu_z B$. Energie fotonu potřebná k *překlopení* spinu protonu mezi oběma orientacemi je

$$hf = 2\mu_z(B_v + B_l), \quad (41.14)$$

kde B_v představuje vnější pole a B_l pole lokální, určené atomy a jádry, které obklopují proton. Měřením těchto spinových překlopení získáme *spektrum jaderné magnetické rezonance*, pomocí kterého můžeme identifikovat různé chemické látky.

Pauliho vylučovací princip

Elektrony v atomech a jiných pastích se při obsazování kvantových stavů řídí *Pauliho vylučovacím principem*, který stanoví, že *žádné dva elektrony v atomu nebo v jiných pastích nemohou mít stejný soubor kvantových čísel n, l, m_l a m_s* .

Struktura periodické soustavy prvků

Prvky jsou v periodické tabulce zařazeny podle vzrůstající velikosti atomového čísla Z ; náboj jádra je roven Ze , kde Z je počet protonů v jádře (a také počet elektronů v obalu neutrálního atomu).

Stavy se stejnou hodnotou hlavního kvantového čísla n tvoří *slupku*, stavy se stejnými hodnotami n a l *podslupku*. V *zaplněných* slupkách a podslupkách (což jsou ty, které obsahují nejvyšší možný počet elektronů) je součet momentů hybnosti a součet magnetických momentů všech elektronů roven nule.

Rentgenové záření a zařazení prvků

Spojitě spektrum rentgenového záření vzniká tehdy, jestliže elektrony o vysoké kinetické energii ztratí část své energie při srážkách s atomy v pevné látce. *Prahovou vlnovou délku* λ_{min} má záření tehdy, ztratí-li elektron *veškerou* svou počáteční energii v jediné srážce s atomem. Její velikost je dána vztahem

$$\lambda_{\text{min}} = \frac{hc}{E_{k,0}}, \quad (41.15)$$

kde $E_{k,0}$ je počáteční kinetická energie elektronů dopadajících na terč.

Charakteristické spektrum rentgenového záření vzniká tehdy, jestliže elektrony s vysokou energií vyrazí vnitřní elektrony atomu; zaplní-li takto vzniklou „díru“ elektron, který se nachází dále od jádra, vznikne foton charakteristického rentgenového spektra.

V roce 1913 britský fyzik H. G. J. Moseley měřil frekvence charakteristického rentgenového záření řady prvků. Zpozoroval, že závislost druhé odmocniny této frekvence na pořadí příslušného prvku v periodické tabulce tvoří přímku, jak je znázorněno v *Moseleyho grafu* na obr. 41.18. Toto zjištění umožnilo Moseleymu ukázat, že vlastnost atomu, která určuje polohu prvku v periodické soustavě, není jeho atomová hmotnost, ale *atomové číslo* Z , tj. počet protonů v jeho jádře.

Lasery a jejich světlo

Laserové světlo vzniká *stimulovanou emisí*. Pod vlivem záření

o frekvenci f dané vztahem

$$hf = E_x - E_0, \quad (41.20)$$

může atom přejít ze stavu s vyšší energií do stavu s nižší energií za současné emise fotonu o frekvenci f . Stimulující a emitovaný foton mají identické fyzikální vlastnosti a dohromady spolu vytvářejí laserové světlo.

K tomu, aby převládl proces emise, je nutné dosáhnout *převerácení (inverze) populace*, tj. musí existovat více atomů ve stavu s vyšší energií než ve stavu s energií nižší.

OTÁZKY

- Elektron v atomu zlata je ve stavu s $n = 4$. Které z uvedených hodnot může l nabývat: $-3, 0, 2, 3, 4, 5$?
- Atom stříbra má zcela zaplněny podslupky $3d$ a $4d$. Obsahují stejný počet elektronů? Pokud ne, která z nich jich má více?
- Atom uranu má zcela zaplněny podslupky $6p$ a $7s$. Která z nich obsahuje více elektronů?
- Elektron v atomu rtuti je v podslupce $3d$. Které z uvedených hodnot může nabývat m_l : $-3, -1, 0, 1, 2$?
- (a) Kolik podslupek a kolik elektronových stavů obsahuje slupka $n = 2$? (b) Jak je tomu pro $n = 5$?
- Pro který z následujících atomů můžeme snadněji odstranit elektron? (a) Krypton, nebo brom? (b) Rubidium, nebo cer? (c) Helium, nebo vodík?
- Na jakých kvantových číslech závisí energie elektronu (a) v atomu vodíku, (b) v atomu vanadu?
- Určete, zda jsou následující tvrzení pravdivá, nebo nepravdivá: (a) Právě jedna (tj. jedna a pouze jedna) z následujících podslupek neexistuje: $2p, 4f, 3d, 1p$. (b) Počet možných hodnot m_l závisí pouze na l a nezávisí na n . (c) Existují čtyři podslupky s $n = 4$. (d) Nejmenší možná hodnota n , která může patřit k danému l , je $l + 1$. (e) Všechny stavy s $l = 0$ mají rovněž $m_l = 0$. (f) Pro každou hodnotu n existuje n podslupek.
- Která z následujících tvrzení týkajících se Einsteinova-de Haasova pokusu jsou pravdivá: (a) Atomy mají moment hybnosti. (b) Moment hybnosti atomů je kvantován. (c) Atomy mají magnetické momenty. (d) Magnetické momenty atomů jsou kvantovány. (e) Moment hybnosti atomu je silně svázán s jeho magnetickým momentem. (f) Experiment je založen na zákonu zachování momentu hybnosti.
- Uvažujte atomy kryptonu a rubidia. (a) Který z nich je vhodnější k provedení Sternova-Gerlachova pokusu popsaného na obr. 41.8? (b) Který z obou atomů by se k provedení tohoto experimentu vůbec nehodil?
- Rentgenové spektrum z obr. 41.15 bylo vytvořeno elektrony s energií 35,0 keV dopadajícími na terč z molybdenu ($Z = 42$). Nahradíme jej terčem ze stříbra ($Z = 47$). Vzroste, sníží se, nebo zůstane beze změny (a) $\lambda_{\min}$, (b) vlnová délka čáry K_α , (c) vlnová délka čáry K_β ?
- Čára K_α vznikne při přechodu mezi K -slupkou ($n = 1$) a L -slupkou ($n = 2$). Na obr. 41.15 má tato čára (pro molybdenový terč) jedinou vlnovou délku. Použijeme-li však vyšší rozlišení, rozdělí se tato čára na několik čar, poněvadž L -slupka nemá pouze jedinou energii. (a) Z kolika složek se ve skutečnosti čára K_α skládá? (b) Z kolika složek se skládá čára K_β ?
- Které z následujících podmínek musí být splněny, aby mohlo dojít mezi dvěma energiovými hladinami v atomu k laserovému efektu: (a) Ve stavu s vyšší energií se nachází více atomů než ve stavu s nižší energií. (b) Stav odpovídající horní energiové hladině je metastabilní. (c) Stav odpovídající dolní energiové hladině je metastabilní. (d) Stav odpovídající dolní energiové hladině je základní stav atomu. (e) Aktivním médiem je plyn.
- Obr. 41.23 ukazuje část energiového diagramu atomů helia a neonu, které se účastní vytváření laserového světla. Víme, že atom helia ve stavu s energií E_3 může srážkou vybudit atom neonu z jeho základního stavu do stavu s energií E_2 . Energie E_3 (20,61 eV) atomu helia je blízka, ale ne přesně rovna energii E_2 (20,66 eV) atomu neonu. Jak může dojít k předání energie, jestliže si tyto energie nejsou *přesně* rovny?

CVIČENÍ & ÚLOHY

ODST. 41.4 Momenty hybnosti a magnetické dipólové momenty

1C. Ukažte, že $\hbar = h/2\pi = 1,06 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 6,59 \cdot 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}$.

2C. Kolik elektronových stavů se nachází v následujících podslupkách: (a) $n = 4, l = 3$; (b) $n = 3, l = 1$; (c) $n = 4, l = 1$; (d) $n = 2, l = 0$?

3C. Kolik elektronových stavů se nachází v následujících slupkách: (a) $n = 4$, (b) $n = 1$, (c) $n = 3$, (d) $n = 2$?

4C. (a) Jaká je velikost orbitálního momentu hybnosti elektronu ve stavu $s, l = 3$? (b) Jaká je největší hodnota jeho průmětu do osy z ?

5C. (a) Kolika možných hodnot může nabývat l pro $n = 3$? (b) Kolika možných hodnot může nabývat m_l pro $l = 1$?

6C. Elektron v atomu vodíku je ve stavu $s, l = 5$. Jaký je nejmenší možný úhel mezi $\mathbf{L}$ a osou z ?

7C. Napište všechna kvantová čísla stavů v podslupce $s, n = 4$ a $l = 3$.

8C. Elektron ve víceelektronovém atomu je ve stavu $s, l = 3$. Jaké jsou možné hodnoty kvantových čísel n, m_l a m_s ?

9C. Elektron ve víceelektronovém atomu má nejvyšší hodnotu kvantového čísla m_l rovnou $+4$. Co můžete říci o jeho zbývajících kvantových číslech?

10C. Kolik kvantových stavů elektronu se nachází ve slupce $s, n = 5$?

11C. Elektron je ve stavu $s, n = 3$. Jaký je počet možných hodnot (a) l , (b) m_l , (c) m_s , (d) počet stavů ve slupce $s, n = 3$ a (e) počet podslupek ve slupce $s, n = 3$?

12Ú. Elektron je ve stavu $s, l = 3$. Vypočítejte a sestavte do tabulky možné hodnoty L_z, μ_z a θ , kde θ je úhel mezi příslušným vektorem a kladným směrem osy z . Určete rovněž velikosti vektorů $\mathbf{L}$ a μ .

13Ú. (Problém související s korespondenčním principem.) Odhadněte (a) hodnotu kvantového čísla l pro kruhový pohyb Země kolem Slunce a (b) počet přípustných orientací roviny dráhy Země v souladu s pravidly o prostorovém kvantování. (c) Nalezněte $\theta_{\min}$, polovinu vrcholového úhlu nejmenšího kužele, opsaného normálou k rovině dráhy Země při oběhu Země kolem Slunce.

14Ú. Změříme-li průmět $\mathbf{L}$ do osy z , ukažte, že o zbývajících dvou složkách vektoru $\mathbf{L}$ můžeme pouze říci, že

$$(L_x^2 + L_y^2)^{1/2} = (l(l+1) - m_l^2)^{1/2} \hbar.$$

ODST. 41.5 Sternův-Gerlachův pokus

15C. Vypočítejte dva možné úhly mezi vektory spinu a magnetického pole z př. 41.1. Mějte na paměti, že orbitální moment hybnosti valenčního elektronu v atomu stříbra je roven nule.

16C. S jakým zrychlením se pohybuje atom stříbra při průchodu vychylujícím magnetem při Sternově-Gerlachově pokusu v př. 41.1?

17C. Předpokládejte, že ve Sternově-Gerlachově pokusu prováděném s neutrálními atomy stříbra má magnetická indukce $\mathbf{B}$ velikost $0,50 \text{ T}$. (a) Jaký je energiový rozdíl opačných orientací atomů stříbra v obou svazcích? (b) Jaká frekvence záření by vedla k přechodu mezi oběma stavy? (c) Jaká je odpovídající vlnová délka tohoto záření a do jaké části spektra patří? Magnetický moment neutrálního atomu stříbra je $1\mu_B$.

18Ú. Předpokládejte, že se atom vodíku v základním stavu pohybuje v úseku délky 80 cm kolmo k magnetickému poli s gradientem $\text{dB}/\text{dz} = 1,6 \cdot 10^2 \text{ T}\cdot\text{m}^{-1}$. (a) Jak velkou silou působí toto pole na atom v důsledku spinového magnetického momentu jeho elektronu, který má velikost μ_B ? (b) Jaká je výchylka atomu ve směru z , proletí-li polem úsek délky 80 cm rychlostí $1,2 \cdot 10^5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$?

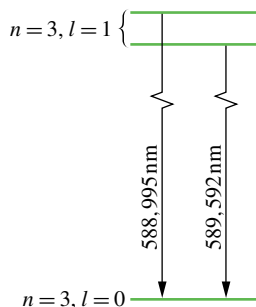
ODST. 41.6 Jaderná magnetická rezonance

19C. Jaká je vlnová délka fotonu, který způsobí překlopení spinu elektronu z polohy souhlasně orientované do polohy nesouhlasně orientované s magnetickým polem o velikosti $0,200 \text{ T}$? Předpokládejte $l = 0$.

20C. Proton i elektron mají spinové kvantové číslo s rovno $\frac{1}{2}$. V atomu vodíku v základním stavu ($n = 1$ a $l = 0$) existují dvě energiové hladiny a jejich hodnoty závisí na tom, zda jsou spiny protonu a elektronu orientovány souhlasně či nesouhlasně. Pokud atom přejde ze stavu s vyšší energií do stavu s energií nižší překlopením spinu, emituje foton o vlnové délce 21 cm . Radioastronomové zaznamenávají záření o této vlnové délce přicházející z hlubokého vesmíru. Jaké je efektivní magnetické pole (v důsledku magnetického dipólového momentu protonu) působící na elektron, který emituje toto záření?

21C. Vnější střídavé magnetického pole o frekvenci 34 MHz působí na vzorek obsahující vodíkové atomy. Magnetickou rezonanci pozorujeme, je-li velikost indukce vnějšího magnetického pole $0,78 \text{ T}$. Vypočítejte velikost indukce lokálního magnetického pole vytvořeného atomy sousedícími s protony, jejichž spiny se překlopily, za předpokladu, že vnější a lokální pole jsou rovnoběžná.

22C. Excitovaný sodíkový atom vyzařuje dvě blízké spektrální čáry (sodíkový dublet — obr. 41.24) o vlnových délkách $588,995$ a $589,592 \text{ nm}$. (a) Jaký je rozdíl energií mezi těmito dvěma horními energiovými hladinami? (b) Tento energiový rozdíl je způsoben tím, že spin elektronu může být orientován buď souhlasně, nebo nesouhlasně s vnitřním magnetickým polem daným orbitálním (magnetickým) momentem elektronu. Použijte výsledků (a) a najděte velikost tohoto vnitřního magnetického pole.



Obr. 41.24 Cvičení 22

ODST. 41.8 Pravoúhlé pasti s více elektrony

23C. Sedm elektronů je zachyceno v jednorozměrné nekonečné potenciálové jámě o šířce L . Jaká je energie základního stavu systému elektronů v násobcích $h^2/(8mL^2)$? Předpokládejte, že elektrony spolu neinteragují, ale uvažujte spin elektronu.

24C. Pravoúhlá hradba o šířkách $L_x = L$ a $L_y = L$ obsahuje sedm elektronů. Jaká je energie základního stavu systému sedmi elektronů v násobcích $h^2/(8mL^2)$? Předpokládejte, že elektrony spolu neinteragují, ale uvažujte spin elektronu.

25Ú. Pro zadání ze cvičení 23 určete, v násobcích $h^2/(8mL^2)$, energie (a) prvního excitovaného stavu, (b) druhého excitovaného stavu a (c) třetího excitovaného stavu systému sedmi elektronů. (d) Vytvořte energiový diagram pro čtyři nejnižší hladiny systému.

26Ú. Pro zadání ze cvičení 24 určete, v násobcích $h^2/(8mL^2)$, energie (a) prvního excitovaného stavu, (b) druhého excitovaného stavu a (c) třetího excitovaného stavu systému sedmi elektronů. (d) Vytvořte energiový diagram pro čtyři nejnižší hladiny systému.

27Ú. Krychlová krabice o hraně L obsahuje osm elektronů. V násobcích $h^2/(8mL^2)$ určete, jaká je energie základního stavu systému osmi elektronů. Předpokládejte, že elektrony spolu neinteragují, ale uvažujte spin elektronu.

28Ú. Pro zadání z úlohy 27 určete, v násobcích $h^2/(8mL^2)$, energii (a) prvního excitovaného stavu, (b) druhého excitovaného stavu a (c) třetího excitovaného stavu systému osmi elektronů. (d) Vytvořte energiový diagram pro čtyři nejnižší hladiny systému.

ODST. 41.9 Struktura periodické soustavy prvků

29Ú. Ukažte, že pokud by 63 elektronů v atomu europia bylo popsáno podle „logické“ řady kvantových čísel, mělo by europium chemické vlastnosti podobné sodíku.

30Ú. Uvažujte prvky selen ($Z = 34$), brom ($Z = 35$) a krypton ($Z = 36$). V jejich části periodické tabulky jsou podslupky zaplňovány v pořadí

$$1s \quad 2s \quad 2p \quad 3s \quad 3p \quad 3d \quad 4s \quad 4p \quad \dots$$

Pro každý prvek určete nejvyšší zaplněnou podslupku a uveďte počty elektronů, které se v ní nalézají.

31Ú. Předpokládejte, že elektron nemá spin, ale že Pauliho vylučovací princip stále platí. Který ze vzácných plynů by pak zůstal vzácným plynem?

32Ú. Jaká jsou čtyři kvantová čísla obou elektronů v atomu helia v jeho základním stavu?

33Ú. Dva elektrony v atomu lithia ($Z = 3$) mají kvantová čísla $n = 1, l = 0, m_l = 0$ a $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Jaké hodnoty kvantových čísel může mít třetí elektron, je-li atom (a) v základním stavu a (b) v prvním excitovaném stavu?

34Ú. Předpokládejte, že v jistém atomu jsou dva elektrony s $n = 2$ a $l = 1$. (a) Pokud by neplatil Pauliho vylučovací princip, kolik kombinací stavů by bylo možno uskutečnit? (b) Kolik stavů by vylučovací princip nedovolil? Jaké jsou to stavy?

35Ú. Ukažte, že počet stavů se stejným kvantovým číslem n je roven $2n^2$.

ODST. 41.10 Rentgenové záření a zařazení prvků

36C. Ukažte, že prahová vlnová délka (v pm) spojitěho rentgenového záření je pro libovolný terč číselně dána výrazem $\lambda_{\min} = 1240/U$, kde U je napětí (v kilovoltech), kterým jsou elektrony před dopadem na terč urychlovány.

37C. Víte-li, že prahová vlnová délka spojitěho rentgenového záření vzniklého dopadem elektronů o energii 40,0 keV na terč je rovna 31,1 pm, určete hodnotu Planckovy konstanty h .

38C. Jaké minimální napětí musíme použít v rentgence, aby vzniklé rentgenové záření mělo vlnovou délku 0,100 nm?

39Ú. Elektron o energii 20 keV ztratí dvěma po sobě jdoucími srážkami s jádry atomů (obr. 41.16) veškerou svou původní energii a předá ji dvěma vzniklým fotonům. Vlnová délka druhého fotonu je o 130 pm delší než vlnová délka prvního fotonu. (a) Určete kinetickou energii elektronu po jeho první srážce. (b) Jaké jsou odpovídající vlnové délky a energie obou fotonů?

40Ú. Rentgenové záření vzniká na terči v rentgence při napětí 50,0 kV. Elektron prodělá tři srážky předtím, než se zastaví. Při prvních dvou srážkách ztratí vždy polovinu své kinetické energie. Určete vlnové délky vzniklých fotonů. (Zanedbejte zpětný odraz těžkých atomů terče.)

41Ú. Ukažte, že pohybující se elektron ve volném prostoru nemůže spontánně vyžárit foton. Musí být přítomno další těleso, atom nebo jádro. Proč? (Tip: Proveďte zákon zachování energie a hybnosti.)

42C. Bombardují-li elektrony molybdenový terč, vzniká jak spojitě, tak charakteristické rentgenové záření podle obr. 41.15. V tomto obrázku je energie dopadajících elektronů rovna 35,0 keV. Zvýšíme-li urychlovací napětí elektronu na 50,0 kV, jaké dostaneme hodnoty (a) $\lambda_{\min}$, (b) vlnové délky čáry K_α a (c) vlnové délky čáry K_β ?

43C. Obr. 41.15 ukazuje rentgenové spektrum při bombardování molybdenového terče ($Z = 42$) elektrony o energii 35,0 keV. Uvažujeme stejnou hodnotu urychlujícího napětí, ale terč ze stříbra ($Z = 47$). Jaké budou hodnoty (a) $\lambda_{\min}$, (b) vlnové délky čáry K_α a (c) vlnové délky čáry K_β ? Rentgenové hladiny

K , L a M atomu stříbra jsou 25,51 keV, 3,56 keV a 0,53 keV (obr. 41.17).

44C. Vlnová délka čáry K_α železa je 193 pm. Jaký je rozdíl energie mezi dvěma hladinami atomu železa pro tento přechod?

45Ú. Pomocí obr. 41.15 vypočítejte přibližnou hodnotu rozdílu energií $E_L - E_M$ pro molybden. Porovnejte tuto hodnotu s hodnotou, kterou můžeme získat z obr. 41.17.

46C. Vypočítejte poměr vlnových délek čáry K_α niobu Nb a galia Ga. Potřebná data jsou uvedena v tabulce v dodatku G.

47Ú. V následující tabulce jsou uvedeny hodnoty vlnových délek (v pm) čar K_α několika prvků:

Ti	275	Co	179
V	250	Ni	166
Cr	229	Cu	154
Mn	210	Zn	143
Fe	193	Ga	134

Z těchto údajů nakreslete Moseleyho graf jako na obr. 41.18 a ověřte, zda hodnota směrnice získané přímkou odpovídá hodnotě vypočtené v př. 41.7.

48Ú. Elektrony v rentgence bombardují terč z wolframu ($Z = 74$). (a) Jaké musí být minimální urychlovací napětí, aby mohly vzniknout charakteristické čáry K_α a K_β wolframu? (b) Určete $\lambda_{\min}$ pro tuto hodnotu urychlovacího napětí. (c) Jaké vlnové délky mají čáry K_α a K_β ? Hladiny K , L a M (obr. 41.17) mají energie 69,5 keV, 11,3 keV a 2,30 keV.

49Ú. Molybdenový terč ($Z = 42$) bombardujeme elektrony o energii 35,0 keV. Vzniklé rentgenové spektrum je na obrázku 41.15. Vlnové délky čar K_α a K_β jsou 63,0 pm a 71,0 pm. (a) Jakou energii mají odpovídající fotony? (b) Chceme-li odfiltrovat z tohoto záření čáru K_β , necháme jej procházet materiálem, který bude záření této vlnové délky absorbovat silněji než čáru K_α . Jaký materiál byste použili? Ionizační energie K -hladin pro molybden a jeho čtyři sousední prvky jsou:

	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru
Z	40	41	42	43	44
E_K (keV)	18,00	18,99	20,00	21,04	22,12

(Tip: Látka absorbuje dané rentgenové záření silněji než jiné, pokud fotony odpovídající jedné vlnové délce mají dostatečnou energii k odtržení K -elektronu z atomu, zatímco druhé fotony nikoli.)

50Ú. Vazební energie elektronů ve slupkách K a L mědi je rovna 8,979 keV a 0,951 keV. Rentgenové záření K_α mědi dopadá na krystal NaCl a vychází po Braggově odrazu 1. řádu pod úhlem $74,1^\circ$ k rovině rovnoběžné s rovinami sodíku v krystalu. Jaká je vzdálenost mezi těmito rovnoběžnými rovinami?

51Ú. (a) Pomocí rov. (41.18) odhadněte vzájemný poměr energií fotonů vzniklých K_α přechodem ve dvou různých atomech, jejichž atomová čísla jsou Z a Z' . (b) Jaký je tento poměr pro uran a hliník? (c) Pro uran a lithium?

52Ú. Určete, jak blízko teoretické hodnoty energie rentgenového fotonu K_α z rov. (41.19) se nacházejí měřené hodnoty

energií pro lehké prvky, od lithia po hořčík, uvedené v tabulce. K tomu je zapotřebí (a) určit hodnotu konstanty C v rov. (41.19) na pět platných míst z rov. (41.16). (b) Dále vypočítejte relativní odchylky teoretických a naměřených hodnot. (c) Na závěr vynešte a diskutujte závislost vypočtených odchylek na atomovém čísle. Měřené hodnoty energie fotonů K_α pro tyto prvky (v eV) jsou

Li	54,3	O	524,9
Be	108,5	F	676,8
B	183,3	Ne	848,6
C	277,0	Na	1 041,0
N	392,4	Mg	1 254,0

(Energiová hladina L je rozštěpená, takže existuje více čar K_α , ale tento jev je pro uvedené prvky zanedbatelný.)

ODST. 41.11 Lasery a jejich světlo

53C. Lasery lze použít k vytváření světelných pulzů, jejichž délka trvání je kratší než 10 fs. Kolik vlnových délek světla ($\lambda = 500$ nm) má takový pulz?

54C. Pro podmínky v př. 41.8 určete, jak velké množství (v mol) aktivního laserového média je nutné k vybuzení 10 atomů do excitovaného stavu s energií E_x .

55C. Měřením doby, která uplyne od vyslání laserového pulzu z pozemské observatoře na odražeče na povrchu Měsíce a zpět, můžeme určit vzdálenost mezi oběma tělesy. (a) Jaká je předpokládaná hodnota této doby? (b) Vzdálenost Země–Měsíc můžeme určit s přesností 15 cm. Jaké nepřesnosti v určení času to odpovídá? (c) Laserový svazek vytváří na povrchu Měsíce stopu o průměru 3 km. Jaká je úhlová divergence svazku?

56C. Hypotetický atom má energiové hladiny rovnoměrně vzdáleny o 1,2 eV. Jaký je poměr počtu atomů ve třináctém a v jedenáctém excitovaném stavu pro teplotu $T = 2\,000$ K?

57C. Hypotetický atom má pouze dvě hladiny energie vzdálené od sebe o 3,2 eV. V atmosféře hvězdy se v každém krychlovém centimetru nachází $6,1 \cdot 10^{13}$ těchto atomů ve stavu s vyšší energií a $2,5 \cdot 10^{15}$ ve stavu s nižší energií. Jaká je teplota atmosféry hvězdy?

58C. Inverzi populace dvou energiových hladin lze popsat tak, že systému přiřadíme *zápornou absolutní teplotu*. Jaká absolutní záporná teplota (v K) by popisovala systém složený z atomů, u kterých je počet atomů na horní energiové hladině o 10 % vyšší než na hladině dolní? Rozdíl energií mezi oběma hladinami je 2,1 eV.

59C. Helium-neonový laser emituje světlo na vlnové délce 632,8 nm o výkonu 2,3 mW. Kolik fotonů za sekundu emituje?

60C. Pulzní laser emituje světlo na vlnové délce 694,4 nm. Trvání pulzu je 12 ps a energie v jednom pulzu je 0,150 J. (a) Jaká je délka pulzu? (b) Kolik fotonů je emitováno v jednom pulzu?

61C. Objem aktivní části polovodičového GaAlAs laseru je pouhých $200 \mu\text{m}^3$ (menší než zrnko písku) a přesto může laser dodávat v kontinuálním režimu výkon 5,0 mW na vlnové délce 0,80 μm . Kolik fotonů za sekundu laser emituje?

62C. Předpokládejte, že máme lasery, které mohou být přesně „nalaďeny“ na libovolnou vlnovou délku ve viditelné oblasti, tj. v intervalu $450 \text{ nm} < \lambda < 650 \text{ nm}$. Pokud každý televizní kanál potřebuje pásmo frekvencí o šířce 10 MHz, kolik kanálů by bylo možné v tomto rozsahu vlnových délek zřídit?

63C. Laserový svazek ($\lambda = 600 \text{ nm}$) s průměrem 12 cm je namířen na Měsíc vzdálený $3,8 \cdot 10^5 \text{ km}$. K rozšíření svazku dochází pouze vlivem difrakce. Úhlová poloha okraje centrálního difrakčního kroužku (rov. (37.12)) je dána vztahem

$$\sin \theta = \frac{1,22\lambda}{d},$$

kde d je průměr apertury svazku. Jaký je průměr středního difrakčního kroužku na povrchu Měsíce?

64C. Aktivní médium rubínového laseru, který generuje laserové světlo o vlnové délce 694 nm, se nachází ve válci 6,0 cm dlouhém o průměru 1 cm. (a) Považujte toto médium za optickou rezonanční dutinu podobnou uzavřené varhanní píšťale. Kolik uzlů stojatého vlnění je v dutině na ose laseru? (b) O jakou frekvenci Δf by se musela stávající frekvence změnit, aby se počet uzlů zvýšil o jeden? (c) Ukažte, že Δf se rovná převrácené hodnotě doby, za kterou svazek vykoná jednu cestu tam a zpět podél osy laseru. (d) Jaká je odpovídající hodnota relativního posuvu frekvence $\Delta f/f$? Index lomu rubínu je 1,75.

65Ú. Zrcadla laseru na obr. 41.22, vzdálená od sebe 8 cm, vytvářejí optický rezonátor, ve kterém může být vytvořeno stojaté vlnění laserového světla. O kolik se liší vlnové délky stojatých vln pro $\lambda \approx 533 \text{ nm}$?

66Ú. Hypotetický atom má dvě energiové hladiny a vyzařuje na vlnové délce 580 nm. V daném vzorku při 300 K je $4,0 \cdot 10^{20}$ atomů ve stavu s nižší energií. (a) Kolik atomů se nachází ve stavu s vyšší energií, je-li systém v termodynamické rovnováze? (b) Představme si, že $3,0 \cdot 10^{20}$ těchto atomů je vnějším procesem „napumpováno“ do stavu s vyšší energií a $1,0 \cdot 10^{20}$ atomů zůstane na nižší energiové hladině. Jakou maximální energii mohou uvolnit atomy v jediném laserovém pulzu, jestliže v každém atomu dojde k jednomu přechodu mezi oběma stavy (ať už absorpcí, nebo stimulovanou emisí)?

67Ú. Svazek světla o průměru $d = 3,00 \text{ mm}$ z argonového laseru má na vlnové délce 515 nm spojitý výkon 5,00 W. Svazek je zaostřen na stínítko čočkou o ohniskové délce $f = 3,50 \text{ cm}$ a vytvoří difrakční obrazec podobně jako na obr. 37.9 s poloměrem středního difrakčního kroužku

$$R = \frac{1,22 f \lambda}{d}$$

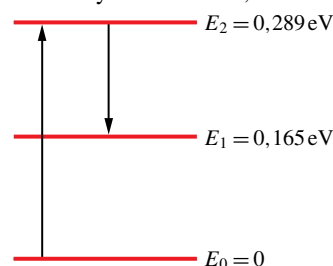
(srovnej s rov. (37.12) a př. 37.3). Střední kroužek obsahuje 84 % z celkového výkonu. (a) Jaký má střední kroužek poloměr? (b) Jaká je průměrná hustota toku energie dopadajícího svazku? (c) Jaká je průměrná hustota toku energie ve středním kroužku?

68Ú. Může být mezikontinentální balistická střela zničena intenzivním laserovým svazkem? Svazek o intenzitě $10^8 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$

se může propálit do vytvrzeného povrchu nerotující střely za 1 s. (a) Pokud by laser měl výkon 5,0 MW, vlnovou délku $3,0 \mu\text{m}$ a svazek o průměru 4 m (vskutku velmi výkonný laser), zničil by střelu vzdálenou 3 000 km? (b) Pokud by se vlnová délka laseru změnila, jaká maximální hodnota by ještě ke zničení střely stačila? Použijte rovnici pro výpočet centrálního difrakčního kroužku ze cvičení 63.

PROBLÉMY

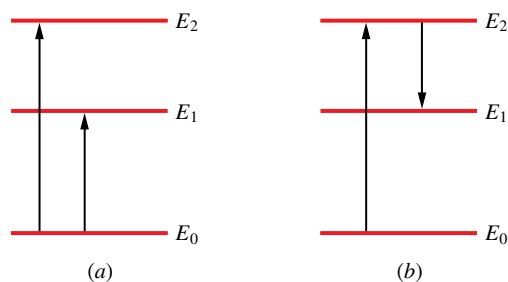
69. *CO₂ laser na Marsu.* Prochází-li sluneční světlo atmosférou Marsu, nastává ve výšce 75 km u molekul kyslíčnicku uhlíčitého přirozený laserový efekt. Energiové hladiny zapojené do tohoto procesu jsou znázorněny na obr. 41.25; k inverzi populace do-



Obr. 41.25 Úloha 69

chází mezi hladinami E_2 a E_1 . (a) Jaká vlnová délka slunečního světla vybuzuje molekuly k laserovému efektu? (b) Pro jakou vlnovou délku dojde k vyzařování laserového světla? (c) V jaké oblasti elektromagnetického spektra leží excitační a laserem vyzařovaná vlnová délka?

70. *Stimulovaná emise na kometě.* Jak se komete přibližuje ke Slunci, Slunce ji více zahřívá a voda odpařená ze zmrzlého ledu na povrchu jádra komety vytváří kolem ní řídkou atmosféru z vodní páry. Sluneční záření pak může disociovat molekuly vodních par na H a OH. Toto záření může rovněž vybudit molekuly OH do stavů s vyšší energií, znázorněných na obr. 41.26.



Obr. 41.26 Úloha 70

Pokud je komete relativně daleko od Slunce, může sluneční světlo způsobit stejnoměrné nabuzení stavů s energiemi E_2 a E_1 (obr. 41.26a). Inverze populace na těchto hladinách tedy nevzniká. Při dalším přibližování komety ke Slunci však excitace na hladinu E_1 klesá a dochází k inverzi populace. Způsobuje to jedna z mnoha vlnových délek tzv. *Fraunhoferových čar*; to jsou (temné) čáry, které chybí ve spektru slunečního světla, poněvadž jsou absorbovány při průchodu světla sluneční atmosférou.

Jak se kometa přibližuje ke Slunci, posouvají se vlnové délky Fraunhoferových čar vlivem Dopplerova jevu v důsledku relativního pohybu komety vůči Slunci, takže se jedna z Fraunhoferových čar překryje s vlnovou délkou potřebnou pro excitaci molekuly OH do stavu s energií E_1 . Nastane inverze populace a molekuly mohou vyzařovat stimulovanou emisí

(obr. 41.26b). Když se například kometa Kohoutek přibližovala v prosinci 1973 a lednu 1974 ke Slunci, vysílala v polovině ledna stimulovanou emisí záření na frekvenci přibližně 1 666 MHz. (a) Jaký je energiový rozdíl $E_2 - E_1$ pro toto záření? (b) V jaké oblasti elektromagnetického spektra se toto záření nachází?