

**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ  
FAKULTA**  
Univerzita Karlova

## **DIPLOMOVÁ PRÁCE**

Bc. Jana Legerská

# **Atom vodíku na vysokoškolské a středoškolské úrovni**

Katedra didaktiky fyziky MFF UK

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Zdeňka Koupilová, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Učitelství fyziky – Učitelství matematiky

Praha 2022



Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne 3. května 2022

Podpis autora



Děkuji RNDr. Zdeňce Koupilové, Ph.D. za vedení mé diplomové práce a za důvěru, se kterou mi svěřila sepsání kapitoly skript ke svému kurzu kvantové mechaniky pro učitele. Patří jí dík také za mnoho cenných rad a připomínek při tvorbě studijních materiálů. Děkuji svému manželovi za jeho podporu a neskonalou trpělivost.



Název práce: Atom vodíku na vysokoškolské a středoškolské úrovni

Autor: Bc. Jana Legerská

Katedra: Katedra didaktiky fyziky MFF UK

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Zdeňka Koupilová, Ph.D., Katedra didaktiky fyziky MFF UK

Abstrakt: Tato diplomová práce se zabývá problematikou výuky atomu vodíku na vysokoškolské a středoškolské úrovni. Cílem práce je porovnat přístupy k výkladu atomu vodíku v dostupných vysokoškolských studijních materiálech a na jejich základě vytvořit studijní text zaměřený na atom vodíku pro studenty druhého ročníku učitelství fyziky na MFF UK, který bude svým rozsahem vyhovovat kurzu kvantové mechaniky pro učitele. Dalším cílem práce je zmapovat dostupné středoškolské materiály týkající se atomu vodíku a navrhnout a zrealizovat seminář pro studenty střední školy, který je seznámí s problematikou atomu vodíku a atomových orbitalů, a vytvořit k němu podpůrné studijní materiály. Součástí této práce je pracovní list k semináři a průvodní text pro učitele a několik úloh zveřejněných ve Sbírce řešených úloh.

Klíčová slova: kvantová mechanika, atom vodíku, atomové orbitaly, studijní text

Title: Hydrogen atom on university and high school level

Author: Bc. Jana Legerská

Department: Department of Physics Education FMP CU

Supervisor: RNDr. Zdeňka Koupilová, Ph.D., Department of Physics Education FMP CU

Abstract: This master thesis is focused on teaching the hydrogen atom on a university and high school level. The objective of this thesis is to compare approaches to hydrogen atom in available university study materials. Based on this comparison, a study text appropriate for the second year students of education of Physics at FMP CU attending the Quantum mechanics course has been prepared. The second goal is to chart available study materials concerning hydrogen atom suitable for high school students. A seminar for high school students has been designed and piloted. Within this seminar, the students were introduced to the hydrogen atom and atomic orbitals. A worksheet for the seminar and an informative text for teachers are enclosed in this thesis together with several tasks published in the Collection of Solved Problems in Physics.

Keywords: quantum mechanics, hydrogen atom, atomic orbitals, study text





# Obsah

Úvod	1
<b>1 Rešerše vybrané literatury</b>	<b>3</b>
1.1 Vysokoškolské studijní materiály k problematice atomu vodíku . . . . .	3
1.2 Středoškolská úroveň . . . . .	6
1.3 Výsledky rešerše . . . . .	9
<b>2 Atom vodíku – Studijní text pro VŠ kurz</b>	<b>11</b>
2.1 Problém dvou těles . . . . .	11
2.2 Schrödingerova rovnice pro atom vodíku . . . . .	17
2.3 Vlnové funkce stacionárních stavů atomu vodíku . . . . .	29
2.4 Další přiblížení modelu atomu vodíku . . . . .	41
<b>3 O orbitalech atomu vodíku – Pracovní list pro SŠ seminář</b>	<b>45</b>
3.1 Průběh semináře . . . . .	46
3.2 Pilotáž semináře . . . . .	68
<b>4 Úlohy do Sbírký řešených úloh</b>	<b>71</b>
Závěr	73
Seznam použité literatury	75
A Pracovní list O orbitalech atomu vodíku	77
B Pracovní list O orbitalech atomu vodíku (zkrácená verze)	85
C Zpětná vazba k semináři	91
D Úlohy do Sbírký řešených úloh	93



# Úvod

Tato diplomová práce se zabývá atomem vodíku a jeho výukou na vysokoškolské i středoškolské úrovni. Jedním z cílů diplomové práce je uvést dostupné materiály pro výuku kvantové mechaniky se zaměřením na výklad atomu vodíku pro obě úrovně.

Prvním hlavním cílem je vytvořit část studijního materiálu pro vysokoškolský kurz *Kvantová mechanika*, který je určen budoucím učitelům fyziky. Vytvořený text pak bude tvořit jednu z kapitol ve skriptech Z. Koupilové a P. Káčovského *Kvantová fyzika (nejen) pro budoucí učitele* [1].

Druhým hlavním cílem je navrhnout náplň semináře určeného pro studenty střední školy, který je seznámí s problematikou atomu vodíku a atomových orbitalů, a vytvořit k němu podpůrné studijní materiály. Dále výuku navrženého semináře zrealizovat se skupinou středoškolských studentů, získat zpětnou vazbu od studentů i učitelů a na jejím základě vytvořené materiály upravit.

Téma diplomové práce jsem si vybrala na základě své zkušenosti s tvorbou studijního materiálu v rámci své bakalářské práce *Studijní text k vybranému tématu předmětu Kvantová mechanika*. V rámci této práce jsem se rozhodla doplnit chybějící kapitolu o atomu vodíku. Zaměřila jsem se také na tvorbu středoškolského studijního materiálu, protože vnímám nedostatek materiálů pro výuku témat z fyziky mikrosvěta, které by středoškolským studentům přiblížily kvantovou mechaniku aktivním způsobem na pro ně přijatelné úrovni.

Práce se skládá ze čtyř kapitol a čtyř příloh. První kapitola je věnována rešerši dostupných materiálů pro výuku problematiky atomu vodíku na vysokoškolské i středoškolské úrovni a popisuje, jakým způsobem ovlivnily nalezené materiály tvorbu studijních textů popsanych v dalších kapitolách.

Druhá kapitola je vlastním studijním textem ke kurzu *Kvantová mechanika* vyučovaném na MFF UK, který je doplněn úlohami. Tato kapitola respektuje grafickou úpravu skript [1] a odkazuje se na již existující části těchto skript.

Ve třetí kapitole je popsán navržený seminář určený studentům střední školy, který se zabývá popisem orbitalů atomu vodíku. K tomuto semináři byl také vytvořen pracovní list s názvem *O orbitalech atomu vodíku*, který je přiložen k této práci v rozšířené verzi (příloha A) a ve zkrácené verzi (příloha B). Tato kapitola zároveň slouží jako průvodní text pro učitele, kteří se rozhodnou seminář využít při své výuce. Naleznou zde autorské řešení a ukázky studentských řešení úkolů z pracovního listu. Na konci této kapitoly je popsán průběh realizace výuky semináře na vybraných středních školách. Je zde také zpracována zpětná vazba od studentů i učitelů a také expertní posouzení navrženého semináře zkušenými učiteli z praxe. Dotazník, pomocí něhož byla zpětná vazba od studentů získána, je uveden v příloze C.

Poslední kapitola je věnována úlohám týkajícím se atomu vodíku, které jsou zveřejněny ve *Sbírce řešených úloh* [2], některé z nich byly zahrnuty také do vysokoškolského studijního textu popsaného v kapitole 2. Každá z pěti úloh je zde krátce popsána, vlastní text úloh a jejich řešení je v příloze D. Úlohy byly tištěny z přímo prostředí *Sbírek řešených úloh* [2] a jsou určeny k prohlížení online. Z tohoto důvodu jejich vzhled v tištěné podobě není ideální.



# 1. Rešerše vybrané literatury

Cílem této rešerše je podat přehled dostupných studijních materiálů pro výuku kvantové mechaniky se zaměřením na atom vodíku na vysokoškolské a středoškolské úrovni. Nejprve se zaměříme na literaturu vysokoškolskou, posléze na literaturu středoškolskou.

## 1.1 Vysokoškolské studijní materiály k problematice atomu vodíku

V této části rešerše je cílem porovnat přístupy dostupných vysokoškolských učebnic zabývajících se problematikou atomu vodíku. Na základě doporučení vedoucí práce byly vybrány a porovnávány tyto vysokoškolské učebnice: *Úvod do kvantové mechaniky* od L. Skály [3], *Úvod do kvantovej mechaniky* autorů J. Pišúta, L. Gomolčáka a V. Černého [4] a také rukopis *Kvantová mechanika pro učitele* autorů O. Bílka a V. Kapsy [5] vzniklý na MFF UK. Z anglické literatury byly vybrány učebnice D. Griffiths: *Introduction to Quantum Mechanics* [6], E. Taylor, A. French: *Introduction to Quantum Physics* [7], D. McIntyre: *Quantum Mechanics: a paradigms approach* [8] a český překlad *Feynmanových přednášek z fyziky s řešenými příklady* trojice autorů R. Feynman, R. Leighton a M. Sands [9].

Tyto učebnice nyní nebudeme komentovat každou zvlášť, ale raději představíme několik oblastí, ve kterých se přístupy jednotlivých učebnic liší či shodují. Na základě porovnání těchto oblastí jsme se pokusili vymezit dva možné přístupy k výkladu problematiky atomu vodíku a rozdělit studovanou literaturu do dvou skupin podle převažujícího přístupu.

### 1.1.1 Porovnání přístupu v učebnicích

Soustředili jsme se na kapitoly týkající se atomu vodíku a momentu hybnosti, který s problematikou atomu vodíku úzce souvisí. První sledovanou oblastí je tematické zařazení problematiky atomu vodíku v rámci celé učebnice. Dále jsme pozorovali, jakým způsobem byla problematika atomu vodíku uvedena a motivována. Další sledovanou oblastí bylo provázání části věnované atomu vodíku s částí věnovanou momentu hybnosti. Poslední oblastí byla strategie řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku.

Oba přístupy spolu se sledovanými oblastmi nyní okomentujeme. Na závěr také uvedeme, jakým způsobem ovlivnily různé přístupy vzniklý studijní text.

#### Zařazení atomu vodíku v rámci učebnice

První oblastí, na niž jsme se při porovnávání přístupů jednotlivých učebnic zaměřili, je zařazení problematiky atomu vodíku do tematické struktury učebnice. Většina studovaných učebnic se zabývala atomem vodíku jako samostatným tématem, a věnovala mu samostatnou kapitolu. Tomuto přístupu se vymykají autoři učebnic [6, 7, 4], kteří atom vodíku pojímají jako příklad jednoduchého trojrozměrného systému (např. spolu s trojrozměrnou nekonečně hlubokou pravoúhlou

potenciálovou jámou a harmonickým oscilátorem) nebo jako aplikaci Schrödingerovy rovnice ve třech dimenzích. Toto tematické zařazení nutně neovlivňuje přístup autorů k výkladu atomu vodíku v dalších oblastech.

### Způsob uvedení do problematiky atomu vodíku

V této oblasti porovnáváme způsob představení fyzikálního systému atomu vodíku. Rozlišujeme, jestli autor přistupuje k atomu vodíku jako k problému dvou těles, resp. problému dvou hmotných bodů, nebo jestli systém popisuje pouze jako pohyb elektronu v poli centrální síly nehybného jádra.

První způsob volí pouze autor [8], který podrobně popisuje přechod od popisu pohybu celé soustavy jádra a elektronu k oddělenému popisu pohybu hmotného středu a hmotného bodu o redukované hmotnosti, včetně myšlenkové mapy výpočtu. Autor [4] problém dvou těles a přechod k redukované hmotnosti zmiňuje pouze jako poznámku v souvislosti s přesnějším určením energetických hladin atomu vodíku. Autoři [5] a [9] představují atom vodíku jako problém dvou těles, ale pro jednoduchost a stručnost neprovádí výpočet.

Tento přístup zahrnující problém dvou těles volilo více autorů, kteří zároveň pojímali atom vodíku jako samostatný problém. Ostatní autoři [3, 6, 7] popisovali atom vodíku přímo pomocí pole centrální síly.

### Provázání s momentem hybnosti

Další zkoumanou oblastí bylo provázání výkladu o atomu vodíku a momentu hybnosti. Moment hybnosti úzce souvisí s popisem systému částice ve sféricky symetrickém potenciálu (tj. v centrálním poli), jakým je například atom vodíku, protože se při pohybu v centrálním poli všechny složky momentu hybnosti i druhá mocnina jeho velikosti v čase zachovávají a jsou tak integrály pohybu, viz [3].

Pro sféricky symetrické potenciály spolu operátor  $\hat{H}$  celkové energie, operátor  $\hat{L}^2$  druhé mocniny velikosti momentu hybnosti a operátor  $\hat{L}_z$  průmětu momentu hybnosti do osy  $z$  navzájem komutují. Operátor druhé mocniny velikosti momentu hybnosti  $\hat{L}^2$  zapsaný ve sférických souřadnicích je obsažen v úhlové části hamiltoniánu  $\hat{H}$  zapsaného ve sférických souřadnicích, který je díky tomu téměř separovatelný. Díky tomu se lze nejprve zaměřit na nalezení úhlové části řešení Schrödingerovy rovnice s obecným sféricky symetrickým potenciálem. Řešením jsou tzv. kulové funkce. Coulombický potenciál atomu vodíku pak lze uvažovat jako konkrétní příklad sféricky symetrického potenciálu. Tento přístup volí autoři učebnic [6, 7, 4]. Autoři učebnic [3, 8, 5, 9] volí jiný postup, kdy Schrödingerovu rovnici řeší již od začátku konkrétně pro atom vodíku (resp. pro vodíku podobný atom v případě [3]).

### Strategie řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku

K řešení Schrödingerovy rovnice lze přistupovat dvěma způsoby. V prvním případě lze Schrödingerovu rovnici řešit přímo pomocí postupu vycházejícího z techniky separace proměnných. V tomto případě řešení začíná stacionární Schrödingerovou rovnicí, která je rovnicí pro hledání vlastních čísel hamiltoniánu. Jde o lineární diferenciální rovnici druhého řádu pro funkci tří proměnných s nekonzstantními koeficienty. Díky tvaru hamiltoniánu hledáme řešení této rovnice ve

tvaru součinu radiální a úhlové části vlnové funkce. Tato rovnice je pak separací proměnných postupně zjednodušena a rozdělena na dílčí jednodušší rovnice pro radiální a úhlovou část vlnové funkce, rovnice pro úhlovou část je ještě dále rozdělena na rovnice pro polární a azimutální část vlnové funkce. Získáme tak tři lineární diferenciální rovnice druhého řádu o jedné proměnné. Tyto rovnice řešíme postupně, získané řešení vždy dosadíme do další rovnice, až dostaneme společné řešení pro všechny tři rovnice.

Ve druhém případě je cílem nalézt společný systém vlastních funkcí operátorů  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$ . Nezačínáme tak přímo Schrödingerovou rovnicí, ale třemi rovnicemi pro hledání vlastních čísel a vlastních funkcí těchto operátorů. Nalezené vlastní funkce jsou zároveň stacionárními vlnovými funkcemi pro elektron v atomu vodíku, protože stacionární Schrödingerova rovnice je zároveň rovnicí pro hledání vlastních čísel operátoru  $\hat{H}$ . Nejprve lze vyřešit jednodušší rovnice pro hledání vlastních čísel operátorů  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$ , a nalézt tak jejich společný systém vlastních funkcí, tj. kulové funkce. Pak lze od těchto jednodušších rovnic postupovat ke složitější Schrödingerově rovnici, nalezenou úhlovou část vlnové funkce do ní dosadit a dále pokračovat stejně jako v prvním případě.

Dílčí rovnice, které se v obou případech objevují, jsou stejné, proto je v obou případech stejná také obtížnost jejich řešení. Oba přístupy se liší pouze ve způsobu organizace řešení. V prvním případě, který je zvolen v publikacích [6, 8, 4, 9], rovnou analyzujeme a rozdělujeme složitou rovnici, zatímco ve druhém přístupu, který nalezneme v [3, 7, 5], nejprve vyřešíme „přípravné“ rovnice a řešení tak „skládáme“ postupně.

### 1.1.2 Dva přístupy k atomu vodíku

Dva přístupy k výkladu atomu vodíku byly vymezeny hlavně na základě provázání s momentem hybnosti a strategie řešení Schrödingerovy rovnice.

První přístup spočívá v přímém řešení Schrödingerovy rovnice pro systém se sféricky symetrickým potenciálem pomocí separace proměnných. Pro tento přístup není nutné se zabývat momentem hybnosti a vlastními funkcemi operátoru  $\hat{L}^2$  dříve než samotným řešením Schrödingerovy rovnice, nicméně výsledky získané při hledání vlastních funkcí operátoru  $\hat{L}^2$  je možné při přímém řešení Schrödingerovy rovnice využít a postup při separaci proměnných tak zjednodušit. Tento přístup volí autoři učebnic [6, 4, 8].

Druhý přístup, který zvolili autoři [3, 7, 5], se vyznačuje řešením Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku s využitím společného systému vlastních funkcí operátorů  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$ . Pro tento přístup je nutné výklad momentu hybnosti předřadit před samotný výklad o atomu vodíku.

### 1.1.3 Tvorba vysokoškolského studijního textu

Pro tvorbu vysokoškolského studijního textu věnovaného atomu vodíku, který bude součástí skript [1] kurzu Kvantová mechanika (NFUF204, NUFY100), byl zvolen druhý způsob přístupu k problematice atomu vodíku popsany výše.

Způsob řešení Schrödingerovy rovnice s využitím společného systému vlastních funkcí komutujících operátorů je dle zkušeností vedoucí práce i názoru autorky

práce pro studenty, setkávající se s kvantovou mechanikou a metodou řešení diferenciálních rovnic pomocí separace proměnných poprvé, přehlednější a snadnější na orientaci.

Nicméně způsob uvedení do problematiky atomu vodíku ve vzniklém studijním textu byl inspirován přístupem učebnice [7], kde je na atom vodíku nahlíženo jako na problém dvou hmotných bodů. Tato část řešení tak je pro studenty zopakováním postupu, se kterým se již setkali v teoretické mechanice, a propojením s kvantovou mechanikou.

## 1.2 Středoškolská úroveň

V této části rešerše jsou uvedeny dostupné středoškolské studijní materiály, které se zabývají problematikou atomu vodíku na středoškolské úrovni. Jako dostupné středoškolské studijní materiály v českém jazyce byly nalezeny učebnice *Fyzika mikrosvěta* [10], *Fyzika pro střední školy* [11] a český překlad učebnice *Fyzika* [12] trojice autorů Halliday–Resnick–Walker. U těchto učebnic jsou stručně popsány nejen kapitoly věnované atomu vodíku, ale také přístup učebnic k uvedení kvantové mechaniky a jejího základního aparátu.

Dále je zde uveden přehled článků, které se zabývají výukou kvantové mechaniky na střední škole se zaměřením na atom vodíku. Na základě těchto materiálů byl navržen obsah semináře *O orbitalech atomu vodíku* a vytvořen pracovní list, viz kapitolu 3 a přílohu A této práce.

### 1.2.1 Středoškolské učebnice kvantové mechaniky

V obou středoškolských učebnicích *Fyzika mikrosvěta* [10] a *Fyzika pro střední školy* [11] z nakladatelství Prometheus je kvantová fyzika představena nejprve na základě experimentů jako je fotoefekt nebo difrakce svazku elektronů na krystalu. V učebnici pro gymnázia je v rámci experimentu se svazkem elektronů v souvislosti s pravděpodobností dopadnutí elektronu na stínítko v určitém místě zavedena vlnová funkce  $\psi(x, y, z, t)$  a hustota pravděpodobnosti  $|\psi|^2$ . Zavedení vlnové funkce i hustoty pravděpodobnosti je pouze teoretické, učebnice neuvádí žádné další příklady ani klasické analogie, na kterých by představu této nové veličiny více přiblížila. Naproti tomu učebnice pro střední školy [11] zůstává na kvalitativní úrovni a nepracuje s pojmem vlnová funkce ani hustota pravděpodobnosti.

V obou učebnicích je představeno kvantování energie na příkladu experimentálních čarových spekter atomů. Učebnice [10] zmiňuje také pojem stacionární stav atomu a definuje jej jako „stav s určitou hodnotou energie, kdy je rozložení elektronů v jeho obalu časově neměnné.“ V rámci kapitoly o atomu vodíku je vedle sebe postaven Bohrovův model atomu a kvantově-mechanický model atomu. Obě učebnice pouze konstatují, že v kvantové mechanice nelze uvažovat trajektorii elektronu, ale pouze pravděpodobnost nalezení elektronu na nějakém místě v atomu. Gymnaziální učebnice na rozdíl od učebnice pro střední školy uvádí pojem orbital a grafické znázornění rozložení hustoty pro některé stavy atomu vodíku. Kromě bodové hustoty pravděpodobnosti učebnice zavádí také radiální hustotu pravděpodobnosti. V obou učebnicích jsou zmíněna kvantová čísla, jejich možné hodnoty a význam. Učebnice [10] se navíc zabývá také degenerací energetických hladin atomu vodíku.



V učebnici *Fyzika* [12] je téma atomu vodíku pojato v podobném rozsahu a obtížnosti jako v učebnici [10], ačkoli se jedná o učebnici určenou i pro vysokoškolské studenty. Autoři nejprve uvádí Bohrov model atomu a popisují kvantování energie elektronu v atomu a čarová spektra atomů. Na rozdíl od [10] uvádí průběh potenciální energie elektrostatického pole tvořeného jádrem a interpretují atom vodíku jako potenciálovou jámu. Tato učebnice, podobně jako [10], pracuje s pojmem vlnová funkce, hustota pravděpodobnosti a radiální hustota pravděpodobnosti. Pro znázornění hustoty pravděpodobnosti nalezení elektronu volí „bodový graf“, který je názornější než modelové znázornění pomocí fotografování světelného zdroje uvedené v [10].

Všechny studované středoškolské učebnice uvádějí pravděpodobnostní model atomu. Učebnice [10] a [12] v rámci tohoto modelu zavádějí dokonce hustotu pravděpodobnosti. Žádná z učebnic ale blíže tuto novou veličinu nevysvětluje a nedává tak studentům možnost se s ní blíže seznámit na jednodušším systému než je atom vodíku. V rámci přípravy středoškolského semináře *O orbitalech atomu vodíku* jsme se rozhodli rovněž využít popis pomocí hustoty pravděpodobnosti, a navíc se pokusit tuto novou veličinu přiblížit studentům na příkladu hustoty pravděpodobnosti klasického oscilátoru, viz kapitolu 3 této práce.

### 1.2.2 Články o výuce kvantové mechaniky na středoškolské úrovni

V této části rešerše stručně shrneme několik článků věnujících se problematice výuky kvantové mechaniky na středoškolské úrovni se zaměřením na atom vodíku a okomentujeme, jakým způsobem ovlivnil přístup článků návrh náplně semináře a tvorbu pracovního listu *O orbitalech atomu vodíku*.

Články pocházejí z časopisů *The Physics Teacher*, *American Journal for Physics*, *Physics Education* a *European Journal of Mathematics and Science Education*.

#### Výuka kvantové mechaniky na středoškolské úrovni

V článku *Teaching Quantum mechanics on an Introductory Level* [13] se jeho autoři Müller a Wiesner zabývají výukou úvodních partií kvantové mechaniky. Kurz, který autoři článku připravili, je určen pro studenty posledních dvou ročníků střední školy nebo vysokoškolským studentům, jejichž hlavním oborem není fyzika a nedisponují tak matematickým aparátem obvykle užívaným v kvantové mechanice. Autoři se rozhodli klást důraz na vybudování konceptuálního rámce, který studentům pomůže překlenout odlišnosti mikrosvěta od světa, který znají z každodenní zkušenosti.

Jedním z konceptů, který ve své práci autoři uvádějí, je „příprava kvantového stavu s danými vlastnostmi.“ Jde o analogii k nastavení počátečních podmínek v klasické fyzice. Příkladem připravení kvantového stavu může být např. průchod fotonů polarizačním filtrem, kdy jsou fotony po průchodu polarizovány v rovině filtru.

Dalším konceptem je tzv. „ensemble interpretation,“ kdy jsou výsledky a předpovědi kvantové mechaniky vztaženy ke vzorku mnoha stejně připravených částic.

Tyto představy pomáhají dle výzkumu autorů [13] lépe pochopit pravděpodobnostní povahu kvantové mechaniky a princip měření v kvantové mechanice.

Oba koncepty byly využity při navrhování pracovního listu *O orbitalech atomu vodíku*, zejména v experimentu s klasickými kuličkami a elektrony, který sloužil pro přiblížení základních principů kvantové mechaniky.

Dalšími články zaměřenými na výuku kvantové mechaniky pro studenty na střední škole jsou články [14] a [15], které se věnují zobrazování reálné i komplexní vlnové funkce pomocí různých grafických nástrojů a vlnově-částicovému dualismu. Tyto články nebyly přímo využity při přípravě semináře, ale mohou být relevantním zdrojem pro výuku jiných partií kvantové mechaniky na střední škole.

## Vizualizace v kvantové mechanice

V článku *A New Multimedia Resource for Teaching Quantum Mechanics Concepts* [16] představuje kolektiv autorů z univerzity St Andrews animace a vizualizace pro výuku kvantové mechaniky, které vznikly v rámci projektu *The Quantum Mechanics Visualisation Project*, krátce označovaného jako *QuVis*. Tyto animace a vizualizace jsou dle mínění autorů užitečným nástrojem pro výuku fyziky a pomáhají studentům rozvíjet představy a konceptuální porozumění kvantové mechanice. Stejnou zkušenost uvádějí také autoři Rebello a Zollman ve svém článku *Conceptual Understanding of Quantum Mechanics After Using Hands-on and Visualization Instructional Materials* [17].

V současné době je v rámci projektu *QuVis* dostupných přes čtyřicet apletů věnovaných různým problémům kvantové mechaniky, jako je např. spin, částice v potenciálové jámě, entanglement, kvantová kryptografie, atd. Animace jsou zaměřeny převážně na vysokoškolské studenty, některé z nich však lze využít také se studenty střední školy. V rámci této práce byl pro navržený seminář použit český překlad apletu [18] sloužící pro vybudování lepší představy o hustotě pravděpodobnosti. V tomto apletu jde o klasický oscilátor a znázornění jeho hustoty pravděpodobnosti.

## Model atomu jako „elektronium“

Ve dvou na sebe navazujících článcích *'Electronium: A Quantum Atomic Teaching Model* [19] a *The Quantum Atomic Model 'Electronium: A Successful Teaching Tool* [19] představuje Marion Budde a kolektiv autorů alternativní model atomu určený studentům středních škol, tzv. „elektronium“, a prezentuje výsledky svého výzkumu při využívání tohoto modelu ve výuce.

Model „elektronia“ slouží jako alternativa k pravděpodobnostnímu modelu atomu, tj. běžně používanému znázornění rozložení hustoty pravděpodobnosti nalezení elektronu v prostoru, které lze experimentálně získat měřením polohy vzorku mnoha elektronů ve stejném kvantovém stavu.

Odlišnost modelu „elektronia“ spočívá v nahrazení představy elektronu jako bodové částice představou elektronu jako určité substance – kontinua s různou hustotou v různých místech – která může být „rozprostřena“ v prostoru. Budde v [19] hovoří o inspiraci Schrödingerem a jeho interpretací hustoty pravděpodobnosti nalezení elektronu jako tzv. nábojové hustoty nebo „elektronového oblaku.“

Budde považuje model „elektronia“ na základě svého výzkumu uvedeného v [20] za lépe pochopitelný pro studenty než pravděpodobnostní model. Při používání pravděpodobnostního modelu si dle [19] studenti častěji ponechávali své představy planetárního modelu atomu a elektronu pohybujícího se uvnitř atomu po trajektorii. „Elektronium“ tak doporučuje jako první krok na cestě k pravděpodobnostnímu modelu atomu.

Na základě kritiky autorů Strnada a Warrena některých fyzikálních vlastností a interpretací modelu „elektronia,“ kterou uvedli v dopisu redakci *'Electronium'? No, thanks* [21], tento model nebyl využit při navrhování semináře *O orbitalech atomu vodíku*. Hlavním důvodem byl způsob, jakým Budde interpretuje „stacionární stavy elektronia,“ kdy považuje elektron, resp. „elektronový oblak elektronia,“ ve stacionárním stavu za nehybný a zakazuje jakýkoli pohyb elektronu v atomu. Při navrhování semináře byl namísto toho využit pravděpodobnostní model, který popisují autoři ve výše zmíněném článku [13].

### Představy učitelů a studentů o atomech

Dvěma dalšími články, které se zabývají představami studentů a učitelů o atomu a modelech atomu, jsou články Kiray: *The Pre-service Science Teachers' Mental Models for Concept of Atoms and Learning Difficulties* [22] a Wiener: *Science Teachers' Conceptions of Atomic Models* [23].

Kiray ve svém článku [22] prezentuje výsledky výzkumu modelů atomů používaných učiteli mateřských škol. Polovina účastníků výzkumu používala Bohrovův model atomu s představou elektronu pohybujícího se po určité dráze. Pouze 10 % respondentů uvádělo model „elektronia“ popsáný v [19] a [20]. U některých učitelů používajících model „elektronia“ byla objevena miskoncepce, kde „elektronový oblak“ interpretovali jako oblak skládající se z elektronů.

Podobný výzkum prováděl v roce 2020 také Wiener [23] na vzorku tisíce učitelů přírodních věd z padesáti osmi zemí světa. Cílem tohoto výzkumu bylo zjistit, jak si atom představují sami učitelé, jaké se učitelé domnívají, že jsou představy o atomech jejich studentů, a jaké modely atomu používají učitelé ve výuce.

V rámci tohoto výzkumu 60 % učitelů uvedlo, že sami používají některý z moderních modelů atomu (blíže popsáných v [23]), mezi nimi např. pravděpodobnostní model nebo orbitalový model. Jen 20 % učitelů tyto modely používalo při výuce. Asi 90 % učitelů uvedlo, že jejich studenti používají k představě atomu některý z historických modelů atomu. Model „elektronia“ v tomto výzkumu nebyl zmíněn.

Seminář navržený v rámci této práce spolu s průvodním vysvětlujícím textem by měl sloužit jako nástroj, jak studentům přiblížit současný pravděpodobnostní model atomu.

## 1.3 Výsledky rešerše

V rámci rešerše vysokoškolských studijních materiálů k tématu atomu vodíku bylo porovnáno sedm vysokoškolských učebnic [6, 7, 3, 4, 8, 9, 5]. Na základě jejich porovnání byly vymezeny dva přístupy k výkladu atomu vodíku a jeden z těchto přístupů byl použit při tvorbě studijního textu pro kurz Kvantová mechanika.

Nalezené výsledky rešerše v oblasti dostupných středoškolských studijních materiálů v českém jazyce nebyly příliš rozsáhlé, jednalo se o tři učebnice [10, 11, 12].

V zahraničních časopisech věnujících se výuce fyziky bylo objeveno několik článků zaměřených na výuku atomu v rámci kvantové mechaniky na středoškolské úrovni, které byly využity k tvorbě semináře a pracovního listu *O orbitalech atomu vodíku* pro studenty střední školy.

## 2. Atom vodíku – Studijní text pro VŠ kurz

V této kapitole prozkoumáme nejjednodušší atom v přírodě – atom vodíku. Jak víme, atom vodíku se skládá z kladně nabitého jádra a jednoho elektronu, který se nachází v jeho okolí, kde působí coulombická elektrostatická síla, tj. budeme uvažovat coulombický potenciál. Stejnou úlohu jsme již řešili v teoretické mechanice – nejprve jsme tzv. *problém dvou těles* převedli na řešení pohybu jediného tělesa, jehož pohybem jsme pak zabývali. Zde budeme postupovat stejně.

### 2.1 Problém dvou těles

Připomeňme si problém dvou těles nejprve klasicky z pohledu teoretické mechaniky. Uvažujme dva hmotné body o hmotnostech  $m_1$  a  $m_2$ , které na sebe vzájemně působí, žádné další vnější silové působení neuvažujeme. Jejich polohové vektory označme  $\vec{r}_1$  a  $\vec{r}_2$  jako na obrázku 2.1a. Jak bude vypadat hamiltonián takového systému? Z teoretické mechaniky víme, že Hamiltonián systému, ve kterém se zachovává celková energie, je dán součtem kinetické a potenciální energie

$$H = T + V. \quad (2.1)$$

Celkovou kinetickou energii dostaneme jako součet kinetických energií obou hmotných bodů, potenciální energie<sup>1</sup> obou hmotných bodů bude záviset jen na jejich vzájemné vzdálenosti, tedy na velikosti rozdílu polohových vektorů  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$ .

Hamiltonián našeho systému bude mít tvar

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2}}_{\text{kinetická energie}} + \underbrace{V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)}_{\text{potenciální energie vzájemného působení}}, \quad (2.2)$$

kde  $\vec{p}_1$  a  $\vec{p}_2$  jsou hybnosti obou hmotných bodů. Vidíme, že tento hamiltonián není *separovaný*, tj. nelze jej rozdělit na dvě části, z nichž každá by závisela pouze na proměnných jednoho hmotného bodu, tj. na  $\vec{r}_1$  a  $\vec{p}_1$ , nebo  $\vec{r}_2$  a  $\vec{p}_2$ , a to kvůli potenciální energii vzájemného působení  $V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ .

Přejdeme do jiného systému souřadnic a najdeme takové proměnné, které nám umožní hamiltonián zapsat v separované podobě. Již jsme zmínili, že potenciální energie závisí na *vzájemné* vzdálenosti obou těles. Vezměme tedy vektor relativní vzdálenosti obou těles

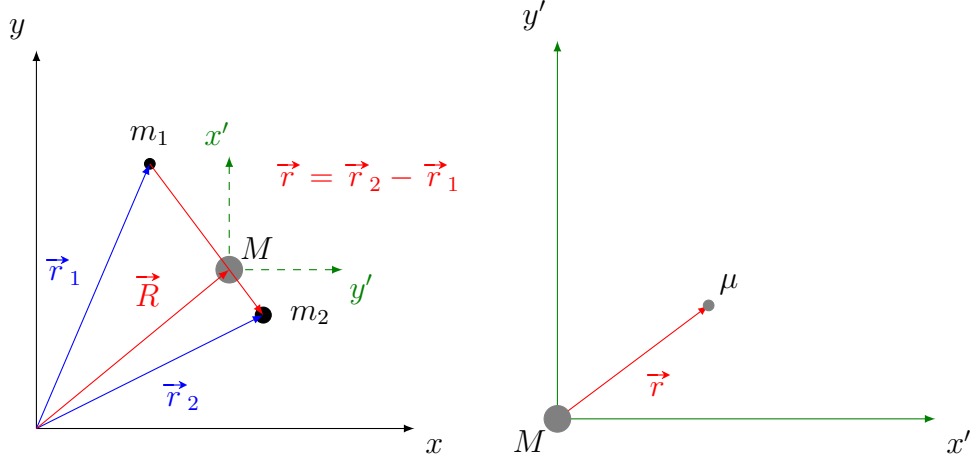
$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \quad (2.3)$$

za novou souřadnici. Druhou souřadnicí bude polohový vektor hmotného středu soustavy

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (2.4)$$

<sup>1</sup>V teoretické mechanice jsme uvažovali potenciální energii v gravitačním poli (šlo o tzv. *Keplerovu úlohu*), zde je pro popis vzájemného působení protonu a elektronu významnější potenciální energie jejich elektrostatického přitahování. Gravitační působení je zcela zanedbatelné. Obě interakce ale mají stejnou závislost na vzdálenosti, proto jsou výpočty v podstatě totožné.

Tyto nové souřadnice představují jiný pohled – místo zkoumání pohybu každého hmotného bodu zvlášť budeme zkoumat pohyb systému jako celku a pohyb „uvnitř systému.“



(a) Původní soustava souřadnic.

(b) Nová soustava souřadnic reprezentující pohyb fiktivního hmotného bodu s hmotností  $\mu$  v poli centrální síly fiktivního hmotného bodu o hmotnosti  $M$ .

Obrázek 2.1: Problém dvou těles.

Potenciální energie  $V$  má v nových souřadnicích  $\vec{r}$  a  $\vec{R}$  jednoduché vyjádření, ale kinetickou energii  $T$  musíme pomocí těchto souřadnic teprve vyjádřit.

Ze vztahů (2.3), (2.4) vyjádříme polohové vektory  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$  a jejich první časové derivace

$$\vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{m_2 \vec{r}}{m_1 + m_2} \quad \dot{\vec{r}}_1 = \dot{\vec{R}} - \frac{m_2 \dot{\vec{r}}}{m_1 + m_2}, \quad (2.5)$$

$$\vec{r}_2 = \vec{R} + \frac{m_1 \vec{r}}{m_1 + m_2} \quad \dot{\vec{r}}_2 = \dot{\vec{R}} + \frac{m_1 \dot{\vec{r}}}{m_1 + m_2} \quad (2.6)$$

a hybnosti<sup>2</sup> obou hmotných bodů

$$\vec{p}_1 = m_1 \dot{\vec{r}}_1 = m_1 \left( \dot{\vec{R}} - \frac{m_2 \dot{\vec{r}}}{m_1 + m_2} \right), \quad (2.7)$$

$$\vec{p}_2 = m_2 \dot{\vec{r}}_2 = m_2 \left( \dot{\vec{R}} + \frac{m_1 \dot{\vec{r}}}{m_1 + m_2} \right). \quad (2.8)$$

<sup>2</sup>Skutečně jde o zobecněné hybnosti příslušné k zobecněným souřadnicím  $\vec{r}$  a  $\vec{R}$ . Lze to ověřit krátkým výpočtem s využitím definice zobecněné hybnosti  $p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}$ , kde  $L = T - V$  je lagrangián systému dvou hmotných bodů v původním systému souřadnic a  $(q_1, q_2, q_3) = \vec{r}_1$ ,  $(q_4, q_5, q_6) = \vec{r}_2$ .

Dosadíme do vztahu pro kinetickou energii

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} \\
 &= \frac{1}{2} m_1 \left( \dot{\vec{R}} - \frac{m_2 \dot{\vec{r}}}{m_1 + m_2} \right)^2 + \frac{1}{2} m_2 \left( \dot{\vec{R}} + \frac{m_1 \dot{\vec{r}}}{m_1 + m_2} \right)^2 \\
 &= \frac{1}{2} (m_1 + m_2) \dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\vec{r}}^2.
 \end{aligned}$$

Ve vztahu pro kinetickou energii nyní vystupují dvě nové hmotnosti. Označíme  $M = m_1 + m_2$  celkovou hmotnost a  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  je tzv. *redukovaná hmotnost*. Přejdeme-li od časových derivací nových souřadnic  $\vec{R}$ ,  $\vec{r}$  k novým hybnostem, tj. položíme-li

$$\vec{P} = M \dot{\vec{R}}, \quad (2.9)$$

$$\vec{p} = \mu \dot{\vec{r}}, \quad (2.10)$$

můžeme kinetickou energii psát ve tvaru

$$T = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu}. \quad (2.11)$$

Hamiltonián tedy finálně můžeme zapsat v separovaném tvaru

$$H = \underbrace{\frac{\vec{P}^2}{2M}}_{\text{pohyb hmotného středu}} + \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r)}_{\text{pohyb v poli centrální síly}}. \quad (2.12)$$

První člen (2.12) můžeme interpretovat jako pohyb hmotného středu jakožto volného hmotného bodu (nepůsobí na něj žádná síla, nemá žádnou potenciální energii). Druhý a třetí člen můžeme interpretovat jako pohyb hmotného bodu o hmotnosti  $\mu$  v poli centrální (radiální) síly s potenciálem  $V(r)$ . Centrum síly, resp. počátek souřadného systému, ve kterém popisujeme pohyb tohoto fiktivního hmotného bodu, je v těžišti celé soustavy, tj. je popsán polohovým vektorem  $\vec{R}$ , jak ukazuje obrázek 2.1b.

Hamiltonián původního problému dvou hmotných bodů o hmotnostech  $m_1$  a  $m_2$ , které se navzájem ovlivňují, se nám povedlo upravit na separovaný tvar, kdy každou jeho část můžeme chápat jako pohyb fiktivního hmotného bodu. Tyto dva fiktivní hmotné body o hmotnostech  $M$  a  $\mu$  se navzájem neovlivňují, jejich pohyb lze řešit nezávisle.

Tím jsme vyřešili klasický problém dvou hmotných bodů. V kvantové mechanice lze postupovat úplně stejně, takže můžeme přepsat získaný výsledek pomocí principu korespondence. Prostým „ostříškovaním“ tak dostaneme hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{r}). \quad (2.13)$$

### 2.1.1 Hamiltonián atomu vodíku

Vraťme se nyní k původnímu problému, kdy našimi hmotnými body jsou jádro atomu vodíku a elektron v poli centrální síly – coulombického potenciálu jádra.

**Úkol 2.1** Jakou mají hodnotu veličiny  $M$  a  $\mu$  v případě lehkého a těžkého atomu vodíku? Jak se bude lišit redukovaná hmotnost  $\mu$  od hmotnosti elektronu? A jak se bude lišit celková hmotnost  $M$  od hmotnosti jádra?

**Řešení:** Jádro lehkého vodíku  ${}^1_1\text{H}$  tvořené jedním protonem má asi dvoutisíckrát větší hmotnost než elektron, tedy  $m_p \approx 2000 m_e$ . Prostým dosazením tedy dojdeme k závěru, že redukovaná hmotnost pro lehký vodík bude přibližně hmotnost elektronu

$$\mu_H = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} = \frac{2000 m_e^2}{2001 m_e} \approx m_e$$

a celková hmotnost bude přibližně hmotnost jádra,

$$M_H = m_p + m_e = 2001 m_e \approx 2000 m_e \approx m_p.$$

Jádro těžkého vodíku  ${}^2_1\text{H}$  (někdy označovaného D jako deuterium) je tvořeno jedním protonem a jedním neutronem. Hmotnost neutronu je přibližně stejná jako hmotnost protonu (liší se asi o jedno promile), tedy  $m_p \approx m_n$ . Hmotnost jádra je dána součtem<sup>3</sup> těchto hmotností

$$m_J = m_p + m_n \approx 2 m_p \approx 4000 m_e.$$

Stejně jako v předchozím případě můžeme vypočítat redukovanou hmotnost pro deuterium

$$\mu_D = \frac{m_J m_e}{m_J + m_e} = \frac{4000 m_e^2}{4001 m_e} \approx m_e$$

a celkovou hmotnost

$$M_D = m_J + m_e = 4000 m_e + m_e \approx 4000 m_e \approx m_J.$$

Je tedy zřejmé, že pro první přiblížení se tyto nové hmotnosti (celková hmotnost, redukovaná hmotnost) od původních hmotností (hmotnosti jádra, hmotnosti elektronu) nijak výrazně neliší ani v případě lehkého vodíku, ani v případě deuteria.

Můžeme tedy s vědomím této malé nepřesnosti v hamiltoniánu (2.13) místo  $M$  a  $\mu$  uvažovat hmotnost jádra  $m_p$  a hmotnost elektronu  $m_e$ . Kdybychom chtěli přesnější výsledek, ponechali bychom v hamiltoniánu hodnoty  $M$  a  $\mu$  a na celém výpočtu by se nic nezměnilo.

---

<sup>3</sup>Vazebnou energii systému proton-neutron neuvažujeme.



## Přesný výpočet

Pokud by nás zajímaly přesné hodnoty redukované a celkové hmotnosti, můžeme provést podrobnější výpočet s pomocí dat např. z [24], kde jsou uvedeny hmotnosti elektronu, protonu a jádra deuteria

$$\begin{aligned}m_e &= 548,579909 \times 10^{-6} \text{ u}, \\m_p &= 1,007276467 \text{ u}, \\m_D &= 2,013553213 \text{ u}.\end{aligned}$$

Pro lehký vodík, resp. deuterium, dostaneme hmotnosti

$$\begin{aligned}\mu_H &= 548,281306 \times 10^{-6} \text{ u}, \\M_H &= 1,007825047 \text{ u},\end{aligned}$$

resp.

$$\begin{aligned}\mu_D &= 548,430669 \times 10^{-6} \text{ u}, \\M_D &= 2,014101792 \text{ u}.\end{aligned}$$

Relativní rozdíl redukované hmotnosti a hmotnosti elektronu a rozdíl celkové hmotnosti a hmotnosti jádra vypočteme jako

$$\begin{aligned}\frac{\Delta\mu_H}{m_e} &= \frac{|\mu_H - m_e|}{m_e} = 0,00054, \\ \frac{\Delta M_H}{m_p} &= \frac{|M_H - m_p|}{m_p} = 0,00054,\end{aligned}$$

resp.

$$\begin{aligned}\frac{\Delta\mu_D}{m_e} &= \frac{|\mu_D - m_e|}{m_e} = 0,00027, \\ \frac{\Delta M_D}{m_D} &= \frac{|M_D - m_D|}{m_D} = 0,00027.\end{aligned}$$

Vidíme, že relativní rozdíly redukované hmotnosti a hmotnosti elektronu jsou v řádu desetiny promile. Pro deuterium, jehož jádro má větší hmotnost než jádro atomu vodíku, je shoda lepší. Pokud by byla hmotnost jádra nekonečná, pak by se redukovaná hmotnost limitně blížila hmotnosti elektronu. Pro první přiblížení tedy můžeme použít přibližné hodnoty redukované hmotnosti z předchozího přibližného výpočtu. Tyto rozdíly v hmotnostech jsou opravdu malé, ale měřitelné. Ovlivní například systém energetických hladin atomu vodíku, což bylo pozorováno při zkoumání vodíkového spektra.

□

**Úkol 2.2** Určete redukovanou hmotnost a celkovou hmotnost pro tzv. *pozitronium*. Jak se tyto hmotnosti liší od hmotnosti elektronu, resp. od jádra pozitronia?

Pozitronium je vázaný systém elektronu a pozitronu (pozitron je antičástice elektronu, má opačný náboj a stejnou hmotnost jako elektron). Tento

exotický vázaný stav, který se podobá atomu vodíku, je velmi nestabilní.

**Řešení:** Pozitron budeme považovat za „jádro“ pozitronia. Potom jádro i elektron mají stejnou hmotnost.

Redukovanou hmotnost  $\mu_P$  vypočteme jako

$$\mu_P = \frac{m_e \cdot m_e}{m_e + m_e} = \frac{m_e^2}{2m_e} = \frac{m_e}{2},$$

celková hmotnost  $M_P$  je

$$M_P = 2m_e.$$

Relativní rozdíl redukované hmotnosti a hmotnosti elektronu, resp. celkové hmotnosti a hmotnosti jádra, vypočteme jako

$$\frac{\Delta\mu_P}{m_e} = \frac{|\mu_P - m_e|}{m_e} = \frac{\frac{m_e}{2}}{m_e} = \frac{1}{2},$$

$$\frac{\Delta M_P}{m_e} = \frac{|M_P - m_e|}{m_e} = \frac{m_e}{2m_e} = \frac{1}{2}.$$

Vidíme, že redukovaná hmotnost  $\mu_P$  je poloviční v porovnání s hmotností elektronu a celková hmotnost  $M_P$  je dvojnásobná v porovnání s hmotností jádra. Tento rozdíl již rozhodně není zanedbatelný a při určování spektra pozitronia je potřeba jej brát v úvahu.

□

### Hamiltonián atomu vodíku pro relativní pohyb elektronu v poli jádra

V úkolu 1 jsme se přesvědčili, že v případě atomu vodíku můžeme v hamiltoniánu (2.13) pro jednoduchost nahradit redukovanou hmotnost hmotností elektronu  $m_e$  a celkovou hmotnost hmotností jádra  $m_J$ .

Jak jsme ukázali v předchozí podkapitole, můžeme řešit zvlášť pohyb „jádra“ a zvlášť pohyb „elektronu“ a pak obě řešení složit dohromady. „Jádro“ zde nahrazuje pohyb atomu jako celku a „elektron“ vzájemný pohyb elektronu a jádra. Dále se budeme zabývat pouze částí hamiltoniánu, která odpovídá vzájemnému pohybu elektronu a jádra, pohyb atomu jako celku uvažovat nebudeme.

Hamiltonián atomu vodíku v tomto přiblížení tak bude mít tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + V(\hat{r}). \quad (2.14)$$

S využitím vztahu pro operátor hybnosti a vztahu pro potenciální energii elektronu v poli jádra můžeme hamiltonián přepsat jako

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta}_{\text{kinetická energie elektronu}} - \underbrace{k \frac{Ze^2}{r}}_{\text{potenciální energie elektronu v poli jádra}}, \quad (2.15)$$

kde  $e$  označuje velikost náboje elektronu,  $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$  elektrostatickou konstantu a  $Z$  je protonové číslo. V případě atomu vodíku je  $Z = 1$ . Při řešení jiných

atomů s jedním elektronem, tzv. vodíku podobných atomů, (např.  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ , ...) můžeme použít stejný výpočet jako u atomu vodíku, jen dosadíme jinou hodnotu protonového čísla (tj. náboje jádra).

Pro atomy s více elektrony v atomovém obalu (např.  $\text{He}$ ,  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Li}$ ,  $\text{Be}$  ...) je situace mnohem složitější, protože se elektrony vzájemně odpuzují. Museli bychom tak řešit problém tří a více těles, který není řešitelný analyticky. Existují ale i jiné metody, jak získat alespoň přibližné řešení i pro tyto atomy, jak uvidíme v kapitole 7.

## 2.2 Schrödingerova rovnice pro atom vodíku

Získali jsme hamiltonián pro elektron v atomu vodíku (2.15), který nezávisí explicitně na čase, stačí tedy vyřešit stacionární Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

Protože coulombický potenciál  $\hat{V}(r)$  závisí pouze na vzdálenosti elektronu od jádra  $|\vec{r}| = r$  a ne na směru, je celý problém sféricky symetrický. Proto bude výhodné přejít při jeho řešení do sférických souřadnic.

### 2.2.1 Odvození tvaru některých operátorů ve sférických souřadnicích

Jak již bylo naznačeno v kapitole 2, klíčovým operátorem pro popis sféricky symetrického systému je operátor momentu hybnosti  $\hat{L}$  a operátor velikosti momentu hybnosti  $\hat{L}^2$ , nyní odvodíme jejich tvar ve sférických souřadnicích.

Vztah kartézského a sférického systému souřadnic je znázorněn na obrázku 2.2, odkud snadno odvodíme vztahy mezi kartézskými souřadnicemi<sup>4</sup>  $(x, y, z)$  a sférickými souřadnicemi  $(r, \theta, \phi)$

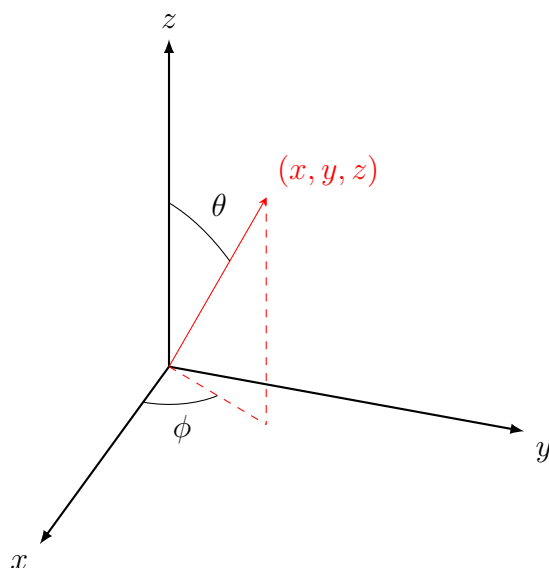
$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi, \\ y &= r \sin \theta \sin \phi, \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \tag{2.16}$$

a pro inverzní transformaci

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \\ \theta &= \arccos \frac{z}{r} = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \\ \phi &= \begin{cases} \arctan \frac{y}{x} & \dots \quad x > 0, y \geq 0 \\ \arctan \frac{y}{x} + \pi & \dots \quad x < 0, y > 0 \\ \arctan \frac{y}{x} + \pi & \dots \quad x < 0, y < 0 \\ \arctan \frac{y}{x} + 2\pi & \dots \quad x > 0, y < 0. \end{cases} \end{aligned} \tag{2.17}$$

<sup>4</sup>V kapitole 2.1 na obrázku 2.1 jsou souřadnice našeho systému označeny čárkovaně  $(x', y', z')$ . Protože zde nebudeme používat jiné kartézské souřadnice, nemůže dojít k záměně, a proto čárky vynecháme.

Funkční hodnoty funkce  $\arctan \frac{y}{x}$  neodpovídají bodům  $(x, y)$  roviny  $xy$  jednoznačně, pro každý kvadrant, ve kterém se bod  $(x, y)$  nachází, je potřeba předpis inverzní funkce definovat zvlášť přičtením vhodné hodnoty z intervalu  $[0, 2\pi]$ .



Obrázek 2.2: Sférické souřadnice

## Operátor momentu hybnosti

Operátor momentu hybnosti je dán vektorovým součinem

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar (\hat{r} \times \nabla) .$$

Provádět vektorový součin v kartézských souřadnicích je mnohem jednodušší než ve sférických, proto nejprve rozepíšeme jednotlivé složky momentu hybnosti v kartézských souřadnicích a až po té je převedeme do sférických. Dostaneme tedy

$$\begin{aligned} \hat{L}_1 &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) , \\ \hat{L}_2 &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) , \\ \hat{L}_3 &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) . \end{aligned} \tag{2.18}$$

Zbývá nám vyjádřit derivace  $\frac{\partial}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial}{\partial y}$ ,  $\frac{\partial}{\partial z}$  pomocí sférických souřadnic. Využijeme řetízkového pravidla pro derivaci složené funkce:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \phi} , \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \phi} , \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \phi} . \end{aligned} \tag{2.19}$$

Určíme všech devět parciálních derivací sférických souřadnic podle kartézských  $\frac{\partial r}{\partial x}, \frac{\partial r}{\partial y}, \dots, \frac{\partial \theta}{\partial z}, \frac{\partial \phi}{\partial z}$  ze vztahů (2.17).

Derivace sférických souřadnic podle  $x$  vypočteme jako

$$\begin{aligned}\frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{r \sin \theta \cos \phi}{r} = \sin \theta \cos \phi, \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right) = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{z^2}{r^2}}} \frac{zx}{r^3} = \frac{1}{\sqrt{r^2 - z^2}} \frac{zx}{r^2} \\ &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{r \cos \theta r \sin \theta \cos \phi}{r^2} = \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi, \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \arctan \frac{y}{x} \right) = \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \left( -\frac{y}{x^2} \right) = -\frac{y}{x^2 + y^2} \\ &= -\frac{r \sin \theta \sin \phi}{r^2 \sin^2 \theta} = -\frac{\sin \phi}{r \sin \theta},\end{aligned}\tag{2.20}$$

derivace podle ostatních kartézských souřadnic vypočteme analogicky a dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{\partial r}{\partial x} &= \sin \theta \cos \phi, & \frac{\partial r}{\partial y} &= \sin \theta \sin \phi, & \frac{\partial r}{\partial z} &= \cos \theta, \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi, & \frac{\partial \theta}{\partial y} &= \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi, & \frac{\partial \theta}{\partial z} &= -\frac{1}{r} \sin \theta, \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} &= -\frac{\sin \phi}{r \sin \theta}, & \frac{\partial \phi}{\partial y} &= \frac{\cos \phi}{r \sin \theta}, & \frac{\partial \phi}{\partial z} &= 0.\end{aligned}\tag{2.21}$$

Operátory derivací podle kartézských souřadnic tedy budou mít tvar

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}.\end{aligned}\tag{2.22}$$

Nyní už stačí jen dosadit výrazy (2.16) a (2.22) do vztahu pro složky momentu hybnosti (2.18) a (poměrně dlouhými) úpravami získáme složky momentu hybnosti vyjádřené ve sférických souřadnicích:

$$\begin{aligned}\hat{L}_1 &= i\hbar \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{L}_2 &= -i\hbar \left( \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{L}_3 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}.\end{aligned}\tag{2.23}$$

Povšimněme si, že složky momentu hybnosti nezávisí na vzdálenosti od počátku  $r$ , ale pouze na úhlových souřadnicích  $\theta, \phi$ . Moment hybnosti má stejnou jednotku jako redukovaná Planckova konstanta  $\hbar$ , proto musí být zbytek výrazu pro složky momentu hybnosti bezrozměrný. To ještě nutně neznamená, že tyto výrazy musí být nezávislé na vzdálenosti  $r$ . Protože ale ve sférických souřadnicích jiná vzdálenost než  $r$  nevystupuje, musí být tyto výrazy opravdu nezávislé na  $r$  a mohou záviset pouze na bezrozměrných souřadnicích  $\theta$  a  $\phi$ .

## Operátor druhé mocniny velikosti momentu hybnosti

Operátor druhé mocniny velikosti momentu hybnosti  $\hat{L}^2$  je dán součtem druhých mocnin<sup>5</sup> jednotlivých složek

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2. \quad (2.24)$$

Dosadíme do něj jeho složky vyjádřené ve sférických souřadnicích,

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 + \left( \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (2.25)$$

Nejprve rozepíšeme první kulatou závorku

$$\begin{aligned} & \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 = \\ & = \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \\ & = \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \\ & + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \end{aligned} \quad (2.26)$$

Výrazy, které nezávisí na proměnných, podle kterých je derivujeme, můžeme přesunout před derivace,

$$\begin{aligned} & = \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \\ & + \cot^2 \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \end{aligned} \quad (2.27)$$

a derivace vypočítat,

$$\begin{aligned} & = \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \sin \phi \cos \phi \left( -\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + \cot \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \right) + \\ & + \cot \theta \cos \phi \left( \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi \partial \theta} \right) + \\ & + \cot^2 \theta \cos \phi \left( -\sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) = \end{aligned} \quad (2.28)$$

což můžeme s využitím toho, že díky spojitosti funkcí můžeme zaměnit pořadí parciálních derivací upravit na

$$\begin{aligned} & = \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + 2 \cot \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} - \\ & - \sin \phi \cos \phi \left( \cot^2 \theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} + \cot \theta \cos^2 \theta \frac{\partial}{\partial \theta}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

<sup>5</sup>Jde o druhou mocninu ve smyslu složení operátorů, tj.  $\hat{L}_z^2 \psi = \hat{L}_z(\hat{L}_z \psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \phi}) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi$ , nikoli  $(\hat{L}_z \psi)^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \right)^2$ .

Analogickými úpravami pro druhou kulatou závorku rovnice (2.25) dostaneme

$$\begin{aligned}
& \left( \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 = \\
& = \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - 2 \cot \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} + \\
& + \sin \phi \cos \phi \left( \cot^2 \theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} + \cot \theta \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \theta}.
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Nyní můžeme obě vypočtené závorky (2.26) a (2.30) dosadit do rovnice (2.25). Vidíme, že členy s opačnými znaménky se odečtou a pomocí goniometrické identity  $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$  můžeme sloučit členy u odpovídajících si parciálních derivací,

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 & = -\hbar^2 \left[ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = \\
& = -\hbar^2 \left[ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + (1 + \cot^2 \theta) \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = \\
& = -\hbar^2 \left[ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = \\
& = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \left( \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right].
\end{aligned} \tag{2.31}$$

S využitím pravidla pro derivování součinu dostaneme tvar druhé mocniny operátoru velikosti momentu hybnosti

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right). \tag{2.32}$$

### Laplaceův operátor

V kinetické energii vystupuje Laplaceův operátor  $\Delta = \nabla^2$ . Odvození jeho tvaru ve sférických souřadnicích je zcela analogické odvození tvaru  $\hat{L}^2$ . Výsledkem je

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \underbrace{\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)}_{\Delta_{\theta, \phi}} \right). \tag{2.33}$$

Jako  $\Delta_{\theta, \phi}$  zde označujeme tu část Laplaceova operátoru, ve které se vyskytují oba úhly a derivace podle nich

$$\Delta_{\theta, \phi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \tag{2.34}$$

Všimněme si, že operátor  $\hat{L}^2$  můžeme zapsat krátce jako

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \phi}. \tag{2.35}$$

## 2.2.2 Hamiltonián atomu vodíku ve sférických souřadnicích

**Úkol 2.3** Napište hamiltonián atomu vodíku ve sférických souřadnicích.

**Řešení:** Do hamiltoniánu (2.15) dosadíme tvar Laplaceova operátoru ve sférických souřadnicích (2.33). S využitím označení (2.34) můžeme hamiltonián zapsat jako

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \Delta_{\theta, \phi} \right] - k \frac{Ze^2}{r}. \quad (2.36)$$

□

Stacionární Schrödingerova rovnice pro atom vodíku má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \Delta_{\theta, \phi} \right] \psi - k \frac{Ze^2}{r} \psi = E\psi, \quad (2.37)$$

což je diferenciální rovnice druhého řádu pro funkci tří proměnných s nekonzstantními koeficienty, jejíž řešení vyžaduje poměrně náročný matematický aparát. Mohli bychom se pustit přímo do jejího řešení, ale je to dosti dlouhý a komplikovaný výpočet. Místo toho nejprve provedeme několik „přípravných prací,“ podobně jako když v matematice nejprve dokážeme několik drobných lemmat pro důkaz stěžejní věty, a celkové řešení Schrödingerovy rovnice se nám tak rozdělí na menší snadněji řešitelné části.

## 2.2.3 Hledání společného systému vlastních funkcí operátorů $\hat{H}$ , $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$

Místo přímého řešení rovnice (2.37) využijeme našich znalostí o komutujících operátorech. Z kapitoly 2.2 díky tvrzení (2.1.3) víme, že dva operátory komutují právě tehdy, když mají společný systém vlastních funkcí. Toto tvrzení můžeme snadno rozšířit na více než dva navzájem komutující operátory.

Víme, že řešení stacionární Schrödingerovy rovnice je vlastně hledání vlastních čísel operátoru celkové energie  $\hat{H}$ . Najdeme-li tedy další operátory, které komutují s hamiltoniánem  $\hat{H}$  i spolu navzájem, musí existovat jejich společný systém vlastních funkcí. Získáme tak více rovnic pro hledání vlastních funkcí. Jedna z nich je naše stacionární Schrödingerova rovnice (2.37) a u dalších budeme doufat, že se alespoň některé budou řešit jednodušeji a nalezneme tak některé části vlnové funkce ještě před řešením samotné Schrödingerovy rovnice.

Oněmi vhodnými operátory jsou operátory druhé mocniny velikosti momentu hybnosti  $\hat{L}^2$  a  $z$ -ové složky momentu hybnosti  $\hat{L}_z$ .

### Výpočtová úloha 2.1

Ověřte, že operátory  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$  navzájem komutují (za předpokladu sféricky symetrického pole, tj.  $\hat{V} = \hat{V}(r)$ ).

**Řešení:** Komutační relaci  $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$ , která platí bez ohledu na to, v jakých souřadnicích jsou operátory vyjádřeny, jsme již ověřili v kapitole 2 v úloze 2.6.



Pro nalezení komutátorů  $[\hat{H}, \hat{L}_z]$  a  $[\hat{H}, \hat{L}^2]$  využijme zkráceného zápisu hamiltoniánu a operátoru  $\hat{L}^2$  pomocí operátoru  $\Delta_{\theta, \phi}$ . Navíc tu část hamiltoniánu, která závisí pouze na proměnné  $r$ , pro větší přehlednost označíme jako  $\hat{F}(r)$ ,

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= -\hbar^2 \Delta_{\theta, \phi}, \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \phi} \right) + \hat{V}(r) \\ &= \underbrace{\left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \hat{V}(r) \right)}_{\hat{F}(r)} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \phi} \\ &= \hat{F}(r) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \phi}.\end{aligned}$$

Dosaďme do komutátoru

$$\begin{aligned}[\hat{H}, \hat{L}_z] &= \hat{H} \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{H} \\ &= -i\hbar \left[ \left( \hat{F}(r) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \phi} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \hat{F}(r) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \phi} \right) \right].\end{aligned}$$

Proměnné  $r, \theta, \phi$  jsou na sobě nezávislé, proto můžeme zaměnit pořadí derivací. Oba členy v závorce jsou tedy stejné a odečtou se. Dostáváme hledaný výsledek

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0. \quad (2.38)$$

Podobně

$$\begin{aligned}[\hat{H}, \hat{L}^2] &= \hat{H} \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{H} \\ &= -\hbar^2 \left[ \left( \hat{F}(r) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \phi} \right) \Delta_{\theta, \phi} - \Delta_{\theta, \phi} \left( \hat{F}(r) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \phi} \right) \right]\end{aligned}$$

a i druhý komutátor je

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0. \quad (2.39)$$

□

Ověřili jsme, že v našem případě operátory  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$  navzájem komutují. Podívejme se tedy na jejich společný systém vlastních funkcí  $\psi = \psi(r, \theta, \phi)$ . Tento systém tvoří takové funkce, které splňují rovnice

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (2.40)$$

$$\hat{L}^2\psi = \lambda\psi, \quad (2.41)$$

$$\hat{L}_z\psi = \mu\psi, \quad (2.42)$$

kde  $E$  je vlastní číslo hamiltoniánu,  $\lambda$  je vlastní číslo operátoru druhé mocniny velikosti momentu hybnosti a  $\mu$  je vlastní číslo<sup>6</sup> operátoru průmětu momentu hybnosti do osy  $z$ .

<sup>6</sup>Je zvykem vlastní číslo operátoru  $\hat{L}_z$  označovat  $\mu$ , ačkoli se běžně používá také k označení redukované hmotnosti, jako např. v kapitole 2.1.

## 1. Rovnice pro $\hat{L}_z$

Začneme poslední z rovnic (2.42), která je nejjednodušší a již jsme ji řešili v kapitole 2 v úloze 2.8, proto zde jen stručně shrneme výsledky. Rovnice má tvar

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \phi} = \mu \psi. \quad (2.43)$$

Jejím řešením je komplexní exponenciála v proměnné  $\phi$

$$\psi(r, \theta, \phi) = \tilde{\psi}(r, \theta) e^{im\phi}.$$

Funkce  $\tilde{\psi}(r, \theta)$  musí být konstantní v proměnné  $\phi$ , tj. může to být libovolná funkce proměnných  $r, \theta$ . Z požadavku na  $2\pi$ -periodičnost v proměnné  $\phi$  dostaneme podmínku pro vlastní čísla operátoru  $L_z$  a příslušná kvantová čísla<sup>7</sup>  $m$

$$\frac{\mu}{\hbar} = m \in \mathbb{Z} \implies m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Kvantovému číslu  $m$  se z důvodů, které se ukážou až později, říká tzv. *magnetické kvantové číslo*.

## 2. Rovnice pro $\hat{L}^2$

Teď budeme řešit druhou z rovnic (2.41), tedy rovnici pro vlastní čísla operátoru druhé mocniny velikosti momentu hybnosti

$$-\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right) \psi = \lambda \psi. \quad (2.44)$$

Místo obecné funkce  $\psi(r, \theta, \phi)$  využijeme výše nalezené řešení rovnice (2.43), protože i řešení této rovnice musí mít uvedený tvar,

$$-\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right) \tilde{\psi}(r, \theta) e^{im\phi} = \lambda \tilde{\psi}(r, \theta) e^{im\phi}.$$

Členy konstantní vůči derivacím podle  $\theta$ , resp.  $\phi$ , vytkneme před derivace a upravíme

$$-\hbar^2 \left( \frac{e^{im\phi}}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \tilde{\psi}(r, \theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{\tilde{\psi}(r, \theta)}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 e^{im\phi}}{\partial \phi^2} \right) \right) = \lambda \tilde{\psi}(r, \theta) e^{im\phi}.$$

V posledním členu na levé straně provedeme naznačenou derivaci

$$\frac{\partial^2 e^{im\phi}}{\partial \phi^2} = -m^2 e^{im\phi} \quad (2.45)$$

a celou rovnici vydělíme nenulovým výrazem  $e^{im\phi}$ .

$$-\hbar^2 \left( \frac{\partial}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \tilde{\psi}(r, \theta)}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \tilde{\psi}(r, \theta) \right) = \lambda \tilde{\psi}(r, \theta).$$

<sup>7</sup>Vlastním číslem operátoru  $\hat{L}_z$  je  $\mu$ , zatímco  $m$  je pouze bezrozměrné číslo (tzv. kvantové číslo zde s přídomkem magnetické), které „očíslovává“ jednotlivé stavy. Protože se  $\mu$  a  $m$  liší pouze násobením konstantou a vztahují se k téměř fyzikálnímu stavu, často dochází k záměně obou pojmů.

Dostali jsme tak diferenciální rovnici (druhého řádu o dvou proměnných s nekonstantními koeficienty) pro funkci  $\tilde{\psi} = \tilde{\psi}(r, \theta)$ . Postup řešení této rovnice je podobný jako v případě lineárního harmonického oscilátoru (myšlenkou i délkou, viz kapitolu 3.8).

Pro vlastní číslo  $\lambda$  operátoru  $\hat{L}^2$  dostáváme podmínku

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1), \quad (2.46)$$

kde tzv. *vedlejší kvantové číslo*  $l$  musí kvůli normovatelnosti řešení splňovat podmínku

$$l = |m| + \text{nějaké nezáporné celé číslo}, \quad (2.47)$$

což můžeme společně s podmínkou pro magnetické kvantové číslo  $m$  přepsat jako

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad \wedge \quad |m| \leq l. \quad (2.48)$$

Vidíme tedy, že magnetické kvantové číslo může nabývat hodnot

$$m = -l, \dots, 0, \dots, l. \quad (2.49)$$

Řešení má tvar

$$\tilde{\psi}(r, \theta) = R(r) N_{lm} P_{lm}(\cos \theta), \quad (2.50)$$

kde  $R(r)$  je libovolná funkce proměnné  $r$  (tj. konstanta vůči  $\theta$  a  $\phi$ ),  $N_{lm}$  je normovací konstanta a  $P_{lm}(\cos \theta)$  jsou tzv. *přidružené Legendreovy polynomy*<sup>8</sup> v proměnné  $\cos \theta$ .

Celkovým řešením rovnice (2.44) jsou pak funkce

$$\psi(r, \theta, \phi) = \underbrace{R(r)}_{\text{radiální část}} \underbrace{N_{lm} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\phi}}_{\text{sférická část } Y_{lm}(\theta, \phi)}, \quad (2.53)$$

kteří se skládají z tzv. radiální části  $R(r)$  závislé pouze na vzdálenosti od počátku a úhlové části

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{lm} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (2.54)$$

kteřou bývá zvykem označovat jako tzv. *kulové funkce* nebo *sférické harmoniky*.

Až dosud jsme při řešení nepoužili rovnici (2.40), v níž je obsažen konkrétní tvar potenciálu  $V(r)$ , který určuje, že se jedná konkrétně o atom vodíku. Kulové funkce jsou tedy řešením každého sféricky symetrického problému. Z toho plyne, že jediná část vlnové funkce, kterou může potenciál ovlivnit, je radiální část.

<sup>8</sup>Přidružené Legendreovy polynomy stupně  $l$  a řádu  $m$  definujeme např. jako

$$P_{lm}(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \left( \frac{d}{d\xi} \right)^{|m|} P_l(\xi). \quad (2.51)$$

Funkce  $P_l(\xi)$  se nazývají *Legendreovy polynomy* stupně  $l$  a definujeme je jako

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \left( \frac{d}{d\xi} \right)^l (\xi^2 - 1)^l. \quad (2.52)$$

### 3. Rovnice pro $\hat{H}$

Nyní nám zbývá vyřešit první rovnici (2.40), tedy stacionární Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \phi} \psi + V(r) \psi = E \psi. \quad (2.55)$$

Zde poprvé použijeme konkrétní, a to coulombický potenciál  $V(r)$ , řešení konkrétně atomu vodíku tak vlastně začíná až tady.

Obecnou funkci  $\psi(r, \theta, \phi)$  opět nahradíme výše nalezeným řešením rovnice (2.41), tj.  $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \psi)$  a využijeme toho, že operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti  $\hat{L}^2$  lze zapsat jako

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \phi}. \quad (2.56)$$

Po dosazení těchto skutečností dostaneme rovnici (2.40) ve tvaru

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} RY + \frac{1}{2m_e r^2} \hat{L}^2 RY - k \frac{Ze^2}{r} RY = ERY. \quad (2.57)$$

Členy konstantní vůči derivacím podle  $r$ , resp.  $\theta$  a  $\phi$ , vytkneme před příslušné derivace a využijeme toho, že kulové funkce jsou vlastními funkcemi operátoru  $\hat{L}^2$ , tj. že

$$\hat{L}^2 Y = \lambda Y. \quad (2.58)$$

Dostaneme

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} Y \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R + \frac{R}{2m_e r^2} \underbrace{\hat{L}^2 Y}_{\lambda Y} - k \frac{Ze^2}{r} RY = ERY. \quad (2.59)$$

Vydělením rovnice  $Y$  a s využitím vztahu (2.46) dostáváme diferenciální rovnici pro funkci  $R = R(r)$  již jen o jediné proměnné  $r$  (ovšem stále druhého řádu s nekonzstantními koeficienty)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} \frac{1}{r^2} R - k \frac{Ze^2}{r} R = ER.$$

Postup při jejím řešení je opět podobný jako u lineárního harmonického oscilátoru. Řešení lze zapsat pomocí tzv. *přídružených Laguerrových polynomů*<sup>9</sup>  $L_{nl} \left( \frac{2r}{na} \right)$ ,

<sup>9</sup>Přídružený Laguerrov polynom řádu  $p$  a stupně  $q - p$  definujeme např. jako

$$L_{q-p}^p(\xi) = (-1)^p \left( \frac{d}{d\xi} \right)^p L_q(\xi), \quad (2.60)$$

kde

$$L_q(\xi) = e^\xi \left( \frac{d}{d\xi} \right)^q (e^{-\xi} \xi^q) \quad (2.61)$$

je tzv. *q-tý Laguerrov polynom*.

Přídružený Laguerrov polynom pro kvantová čísla  $n, l$  stupně  $n - l - 1$  označujeme jako

$$L_{nl} \equiv L_{n-l-1}^{2l+1} = (-1)^{2l+1} \left( \frac{d}{d\xi} \right)^{2l+1} L_{n+l}(\xi). \quad (2.62)$$

kde  $n$  je tzv. *hlavní kvantové číslo*,  $a$  označuje Bohrovův poloměr

$$a = \frac{\hbar^2}{k m_e e^2} \approx 5 \cdot 10^{-11} \text{ m}. \quad (2.63)$$

Řešením rovnice (2.40) je funkce

$$R(r) = \widetilde{N}_{nl} \left( \frac{2r}{na} \right)^l L_{nl} \left( \frac{2r}{na} \right) e^{-\frac{r}{na}}, \quad (2.64)$$

kde  $\widetilde{N}_{nl}$  je normovací konstanta. Z podmínky normovatelnosti vlnové funkce dostaneme během výpočtu pro hlavní kvantové číslo podmínku

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad \wedge \quad n > l. \quad (2.65)$$

Dále dostáváme vztah pro energii

$$E_n = -k \frac{Z^2 e^2}{2a} \frac{1}{n^2} = Z^2 \frac{E_1}{n^2}, \quad (2.66)$$

kde

$$E_1 \doteq -13,6 \text{ eV}$$

je energie základního stavu atomu vodíku.

## 2.2.4 Celkové řešení

Celkovým řešením soustavy rovnic (2.40–2.42) jsou vlnové funkce, které tvoří společný systém vlastních funkcí operátorů  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$  a mají tvar

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{nlm} \left( \frac{2r}{na} \right)^l L_{nl} \left( \frac{2r}{na} \right) e^{-\frac{r}{na}} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (2.67)$$

Konstanta  $N_{nlm}$  je celková normovací konstanta, která je součinem normovacích konstant sférické a radiální části

$$N_{nlm} = N_{lm} \widetilde{N}_{nl}.$$

□

Ač řešením nejsou pěkné a jednoduché funkce, lze je analyticky zapsat. V kapitole 7 uvidíme, že to zdaleka není samozřejmostí, naopak u většiny systémů (třeba už jen o něco málo složitější molekuly  $\text{H}_2^+$ ) přesné řešení analyticky zapsat nelze.

Kvantová čísla  $n, l, m$  musí splňovat podmínky

$$\begin{aligned} n &\in \mathbb{N}, \\ l &\in \mathbb{N}_0, & l < n, \\ m &\in \mathbb{Z}, & |m| \leq l. \end{aligned}$$

Pro vlastní čísla operátorů  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$  platí vztahy

$$E = -13,6 \text{ eV} \frac{Z^2}{n^2},$$

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1),$$

$$\mu = \hbar m.$$

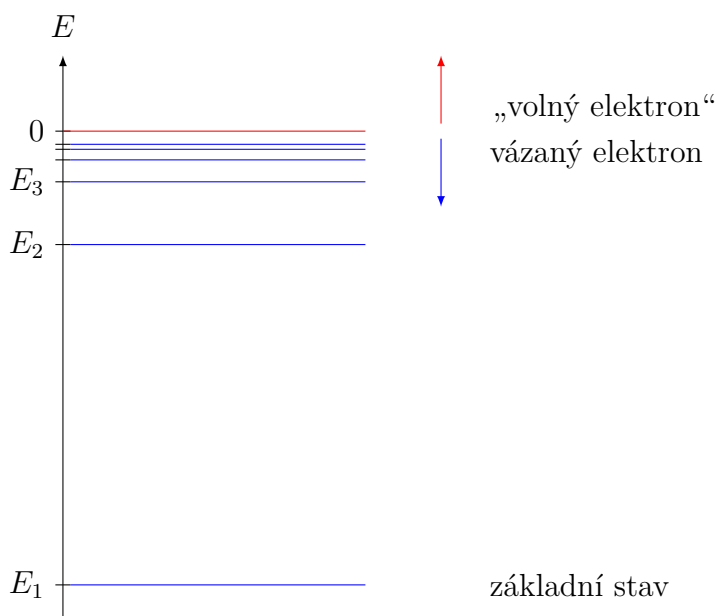
Připomeňme, že jsme získali *stacionární stavy* atomu vodíku, tedy stavy s ostrou hodnotou energie. Pokud by nás zajímaly *nestacionární stavy* atomu vodíku, museli bychom vzít řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice, které získáme jako lineární kombinaci stacionárních řešení

$$\Psi(r, \theta, \phi, t) = \sum_{n,l,m} c_{nlm} \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) e^{\frac{E_n t}{i\hbar}}, \quad (2.68)$$

v tomto textu se ale omezíme pouze na stacionární řešení.

**Úkol 2.4** Načrtněte na svislou energetickou osu hodnoty povolených energií, tzv. energetické hladiny atomu vodíku. Jak je možné, že je energie záporná?

**Řešení:** Energie elektronu v atomu vodíku je dána vztahem (2.66), závisí na hlavním kvantovém čísle jako  $\frac{1}{n^2}$ . Energie  $E_1, E_2, E_3, \dots$  na obrázku 2.3 odpovídají vázaným stavům elektronu v atomu vodíku. Je vidět, že se s rostoucím  $n$  „zahušťují“ a limitně se přibližují k nulové hladině. Stavy s nezápornou energií by pak odpovídaly rozptylovým stavům elektronu, který „prolétá kolem.“ Tato energie už by nebyla kvantovaná, „volný“ elektron by mohl mít libovolnou (kladnou) energii.



Obrázek 2.3: Systém energetických hladin atomu vodíku

Energie vázaných stavů elektronu v atomu vodíku je záporná díky tomu, že jsme zvolili nulovou hodnotu potenciální energie v nekonečnu. Jde o vazebnou energii elektronu v atomu, tedy energii, kterou je nutno dodat pro vytržení elektronu z atomu.

□

## 2.3 Vlnové funkce stacionárních stavů atomu vodíku

V předchozí kapitole jsme vyřešili stacionární Schrödingerovu rovnici pro atom vodíku a našli jsme tak analytický zápis příslušných stacionárních vlnových funkcí.

Vlnová funkce samotná nemá fyzikální význam, ten má až druhá mocnina absolutní hodnoty vlnové funkce, který je roven hustotě pravděpodobnosti nalezání elektronu v prostoru. Proto nás bude zajímat nejen geometrické znázornění vlnových funkcí samotných, ale především průběh hustoty pravděpodobnosti.

Na tomto místě se často setkáváme s pojmem *orbital*, který můžeme chápat jako část prostoru, ve které se elektrony nacházejí s velkou pravděpodobností nebo přímo jako označení pro prostorový průběh hustoty pravděpodobnosti. Dále tedy budeme zkoumat tvar orbitalů atomu vodíku.

Díky vztahu (2.67) víme, že stacionární vlnovou funkci atomu vodíku  $\psi_{nlm}$  můžeme zapsat jako součin radiální části  $R_{nl}$  a sférické části  $Y_{lm}$ ,

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi).$$

Podívejme se nyní na každou část zvlášť.

### 2.3.1 Sférická část vlnové funkce

Sférická část vlnové funkce říká, jak se vlnová funkce mění v závislosti na zvoleném směru, který je určen úhly  $\theta$  a  $\phi$  a popisují ji tzv. kulové funkce  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ . Připomeňme, že ji můžeme zapsat jako součin dvou dílčích funkcí, z nichž každá závisí jen na jedné úhlové souřadnici

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi), \quad (2.69)$$

kde

$$\begin{aligned} \Theta_{lm}(\theta) &= N_{lm} P_{lm}(\cos \theta), \\ \Phi_m(\phi) &= e^{im\phi}. \end{aligned}$$

Závislost na  $\phi$  je jednoduchá, jedná se o komplexní exponenciálu a je to zároveň jediná komplexní část vlnové funkce. Její absolutní hodnota je rovna jedné pro všechna  $\phi$ , proto spočítáme-li hustotu pravděpodobnosti, závislost na  $\phi$  zmizí. Rozložení hustoty pravděpodobnosti tak bude vždy rotačně symetrické kolem osy  $z$ .

### Přidružené Legendreovy polynomy

Závislost sférické části vlnové funkce na úhlu  $\theta$  popisují funkce  $P_{lm}(\cos \theta)$ , což jsou tzv. přidružené Legendreovy polynomy definované v předchozí sekci vztahem (2.51).

**Úkol 2.5** Napište první čtyři Legendreovy polynomy.

**Řešení:** Legendreovy polynomy pro  $l = 1, 2, 3, 4$  vypočteme podle vztahu (2.52). Např. pro  $l = 1$  dostaneme

$$P_1(\xi) = \frac{1}{2} \frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1)^1 = \frac{1}{2} \cdot 2\xi = \xi.$$

Pro další kvantová čísla  $l$  dostaneme polynomy

$$\begin{aligned} P_0(\xi) &= 1, \\ P_1(\xi) &= \xi, \\ P_2(\xi) &= \frac{1}{2}(3\xi^2 - 1), \\ P_3(\xi) &= \frac{1}{2}(5\xi^3 - 3\xi). \end{aligned}$$

□

**Úkol 2.6** Napište přidružené Legendreovy polynomy v proměnné  $\cos \theta$  pro  $l = 0, 1, 2, 3$  a druhou mocninu jejich absolutní hodnoty. Pro některé z nich zkuste načrtnout polární graf nebo si ho zobrazte na počítači.

**Řešení:** Pro výpočet přidružených Legendreových polynomů použijeme definiční vztah (2.51) a využijeme již vypočtené Legendreovy polynomy z úkolu 5. Místo proměnné  $\xi$  teď dosadíme  $\cos \theta$ . Díky tomu, že se ve vztahu (2.51) kvantové číslo  $m$  vyskytuje pouze v absolutní hodnotě, je  $P_{lm}(\xi) = P_{l(-m)}(\xi)$ .

Např. pro  $l = 1, m = \pm 1$  dostaneme

$$P_{11} = (1 - \xi^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{d\xi} P_1(\xi) = \sqrt{1 - \xi^2} \frac{d}{d\xi} (\xi) = \sqrt{1 - \xi^2}.$$

Pro kombinace nízkých hodnot kvantových čísel  $l$  a  $m$  dostaneme polynomy

$P_{00}(\xi) = 1$	$P_{00} = 1$
$P_{10}(\xi) = \xi$	$P_{10} = \cos \theta$
$P_{11}(\xi) = \sqrt{1 - \xi^2}$	$P_{11} = \sin \theta$
$P_{20}(\xi) = \frac{1}{2}(3\xi^2 - 1)$	$P_{20} = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$
$P_{21}(\xi) = 3\xi \sqrt{1 - \xi^2}$	$P_{21} = 3 \sin \theta \cos \theta$
$P_{22}(\xi) = 3(1 - \xi^2)$	$P_{22} = 3 \sin^2 \theta$
$P_{30}(\xi) = \frac{1}{2}(5\xi^3 - 3\xi)$	$P_{30} = \frac{1}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
$P_{31}(\xi) = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \xi^2} (15\xi^2 - 3)$	$P_{31} = \frac{3}{2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 3 \sin \theta)$
$P_{32}(\xi) = 15\xi(1 - \xi^2)$	$P_{32} = 15 \sin^2 \theta \cos \theta$
$P_{33}(\xi) = 15(1 - \xi^2)^{\frac{3}{2}}$	$P_{33} = 15 \sin^3 \theta$



a druhé mocniny jejich absolutní hodnoty

$$\begin{aligned}
 |P_{00}|^2 &= 1 & |P_{30}|^2 &= \frac{1}{4} (25 \cos^6 \theta - 30 \cos^4 \theta + 9 \cos^2 \theta) \\
 |P_{10}|^2 &= \cos^2 \theta & |P_{31}|^2 &= \frac{9}{4} \sin^2 \theta (25 \cos^4 \theta - 10 \cos^2 \theta + 1) \\
 |P_{11}|^2 &= \sin^2 \theta & |P_{32}|^2 &= 225 \sin^4 \theta \cos^2 \theta \\
 |P_{20}|^2 &= \frac{1}{4} (9 \cos^4 \theta - 6 \cos^2 \theta + 1) & |P_{33}|^2 &= 225 \sin^6 \theta \\
 |P_{21}|^2 &= 9 \sin^2 \theta \cos^2 \theta & |P_{22}|^2 &= 9 \sin^4 \theta
 \end{aligned}$$

Polární graf získáme tak, že pro daný úhel  $\theta$  nakreslíme na polopřímku svírající s osou  $z$  úhel  $\theta$  bod grafu, jehož vzdálenost od počátku se rovná velikosti funkční hodnoty zobrazované funkce. Úhel  $\theta$  měříme v záporném smyslu od osy  $z$ . Pokud je funkční hodnota záporná, zakreslíme bod např. jinou barvou.<sup>10</sup>

Na obrázku 2.4 je znázorněn polární graf funkce  $P_{10} = \cos \theta$ , resp.  $P_{11} = \sin \theta$ . Pro funkci  $\cos \theta$  je ve směru osy  $z$  ( $\theta = 0$ ) funkční hodnota rovna jedné, protože  $\cos 0 = 1$ . S rostoucím úhlem  $\theta$  funkční hodnoty klesají, až při  $\theta = \frac{\pi}{2}$  je funkční hodnota nulová, protože  $\cos \frac{\pi}{2} = 0$ . Funkční hodnoty pro  $\theta \in (0, \frac{\pi}{2})$  odpovídají na obrázku 2.4 plně červené linii. Při dále se zvětšujícím úhlu  $\theta \in (\frac{\pi}{2}, \pi)$  budou funkční hodnoty záporné, pro  $\theta = \pi$  je  $\cos \theta = -1$ . Body grafu pro  $\theta \in (\frac{\pi}{2}, \pi)$  jsou zakresleny modrou plnou linií, která značí zápornou hodnotu. Funkce  $\sin \theta$  má v intervalu  $[0, \pi]$  kladné hodnoty, které opět odpovídají plně červené linii.

Ve sférických souřadnicích je úhel  $\theta$  definován jako úhel z intervalu  $[0, \pi]$ . Proto v polárním grafu pro úhly z intervalu  $(\pi, 2\pi)$  nevykresluje funkční hodnoty, ale pouze zrcadlový obraz funkce z intervalu  $(0, \pi)$ , jak je v obrázku 2.4 naznačeno přerušovanou čarou. Tento zrcadlový obraz nepřináší žádnou novou informaci, pouze nám pomáhá vytvořit si lepší představu o tvaru funkce.

Pro zkoumání hustoty pravděpodobnosti nás více než samotné přidružené Legendreovy polynomy budou zajímat druhé mocniny jejich absolutní hodnoty, které jsou vykresleny v polárních grafech v tabulce 2.1. (Zde již funkce a její zrcadlový obraz nejsou odlišeny přerušovanou čarou.)

□

## Kulové funkce

Kulové funkce jsou společnými vlastními funkcemi operátorů  $L_z$  a  $L^2$ . Závisí na proměnných  $\theta$ ,  $\phi$  a označujeme je kvantovými čísly  $l$  a  $m$ . Pro ilustraci vypíšeme několik prvních kulových funkcí.

<sup>10</sup>Alternativním způsobem zakreslení bodů pro zápornou funkční hodnotu je zakreslení bodů do grafu na opačnou polopřímku, než na které by byla kladná funkční hodnota stejné velikosti.

$$\begin{aligned}
Y_{00}(\theta) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} & Y_{30}(\theta) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \\
Y_{10}(\theta) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta & Y_{3\pm 1}(\theta) &= \pm \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi} \\
Y_{1\pm 1}(\theta) &= \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} & Y_{3\pm 2}(\theta) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi} \\
Y_{20}(\theta) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) & Y_{3\pm 3}(\theta) &= \pm \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi} \\
Y_{2\pm 1}(\theta) &= \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} & & \vdots \\
Y_{2\pm 2}(\theta) &= \pm \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} & & 
\end{aligned}$$

V tabulce 2.2 je vykreslena reálná a imaginární část prvních čtyř kulových funkcí a také druhá mocnina jejich absolutní hodnoty.

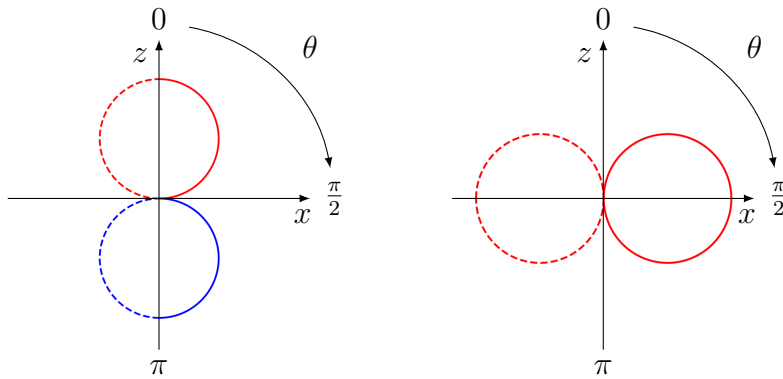
### Sférická část hustoty pravděpodobnosti $|Y_{lm}|^2$

Sférickou část hustoty pravděpodobnosti vypočteme jako druhou mocninu absolutní hodnoty kulových funkcí

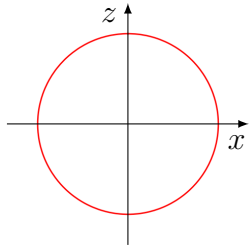
$$|Y_{lm}|^2 = |N_{lm} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\phi}|^2 = |N_{lm}|^2 |P_{lm}(\cos \theta)|^2. \quad (2.70)$$

Protože sférická část hustoty pravděpodobnosti nezávisí na úhlu  $\phi$ , její celkový prostorový průběh dostaneme, pokud vezmeme polární graf druhé mocniny absolutní hodnoty Legendreových polynomů a zarotujeme jej kolem osy  $z$ .

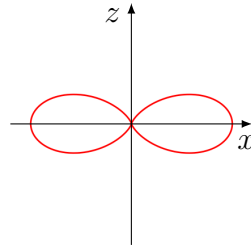
Pro lepší představu jsou na obrázku 2.5 vedle sebe znázorněny druhé mocniny absolutní hodnoty přidružených Legendreových polynomů v proměnné  $\cos \theta$  pro kvantové číslo  $l = 1$  a druhá mocnina absolutní hodnoty příslušných kulových funkcí. Stejnou úvahou si lze na základě polárních grafů druhých mocnin přidružených Legendreových polynomů z tabulky 2.1 představit tvar kulových funkcí pro jiná kvantová čísla.



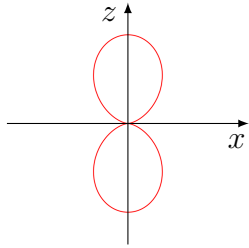
Obrázek 2.4: Polární graf funkce  $P_{10} = \cos \theta$  (vlevo) a  $P_{11} = \sin \theta$  (vpravo). Kladné funkční hodnoty jsou označeny červenou barvou, záporné modrou barvou, zrcadlový obraz funkce z intervalu  $[0, \pi]$  přerušovaně.



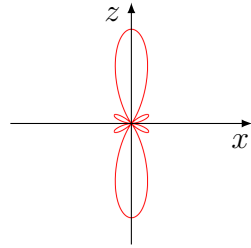
$$|P_{00}|^2 = 1$$



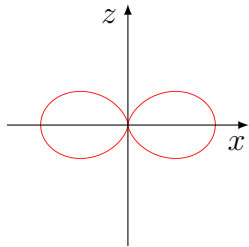
$$|P_{22}|^2 = 9 \sin^4 \theta$$



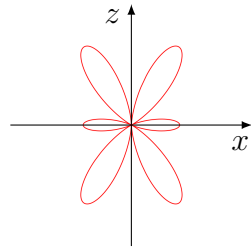
$$|P_{10}|^2 = \cos^2 \theta$$



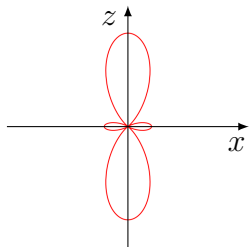
$$|P_{30}|^2 = \frac{1}{4} (25 \cos^6 \theta - 30 \cos^4 \theta + 9 \cos^2 \theta)$$



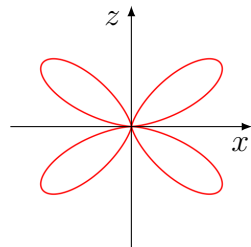
$$|P_{11}|^2 = \sin^2 \theta$$



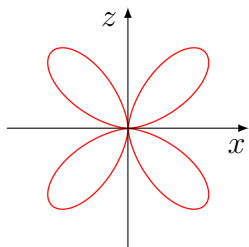
$$|P_{31}|^2 = \frac{9}{4} \sin^2 \theta (25 \cos^4 \theta - 10 \cos^2 \theta + 1)$$



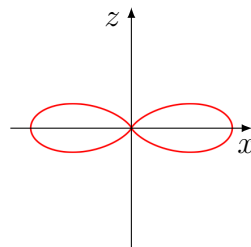
$$|P_{20}|^2 = \frac{1}{4} (9 \cos^4 \theta - 6 \cos^2 \theta + 1)$$



$$|P_{32}|^2 = 225 \sin^4 \theta \cos^2 \theta$$

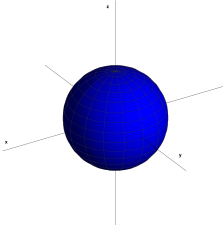
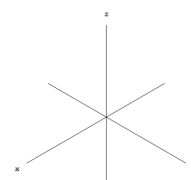
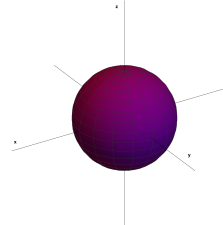
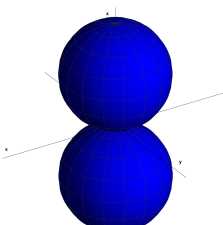
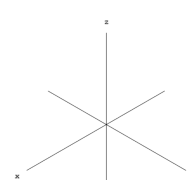
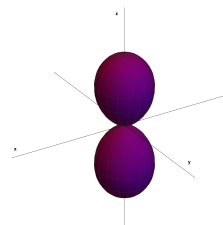
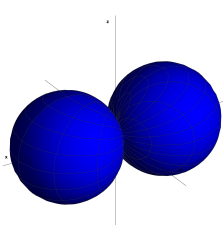
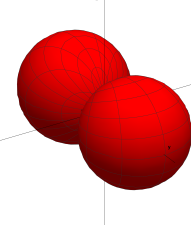
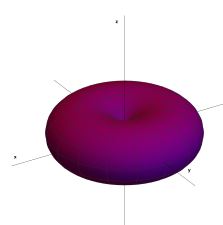
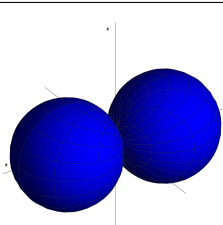
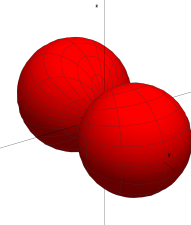
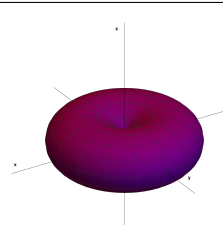


$$|P_{21}|^2 = 9 \sin^2 \theta \cos^2 \theta$$

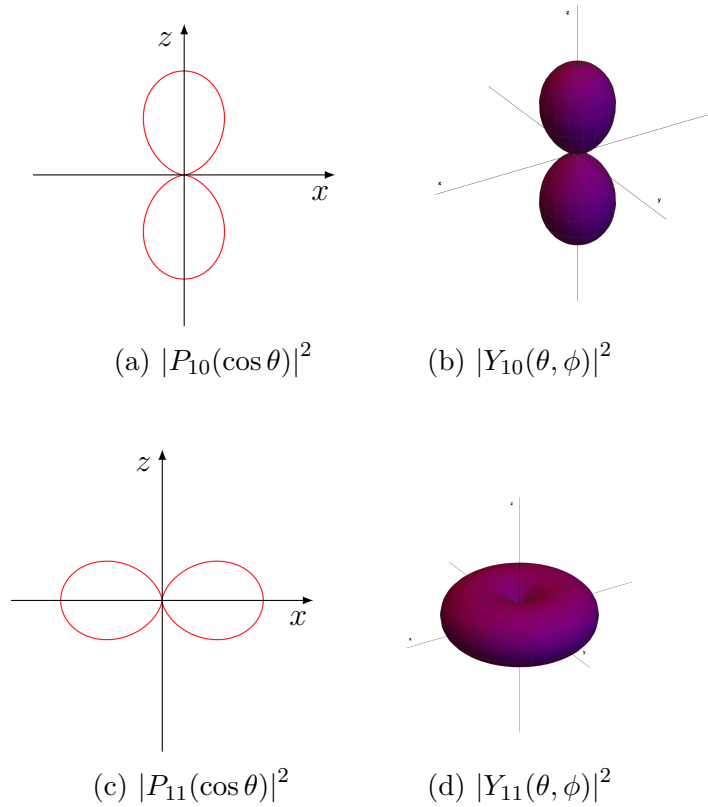


$$|P_{33}|^2 = 225 \sin^6 \theta$$

Tabulka 2.1: Znázornění druhé mocniny absolutní hodnoty přidružených Legendrových polynomů v proměnné  $\cos \theta$  v polárním grafu pro nízká kvantová čísla  $l, m$ . Pro přehlednost není měřítko v jednotlivých obrázcích stejné.

	$\text{Re}(Y_{nl})$	$\text{Im}(Y_{nl})$	$ Y ^2$
$Y_{00}$	 $\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}}$	 0	 $\frac{1}{4\pi}$
$Y_{10}$	 $\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$	 0	 $\frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta$
$Y_{11}$	 $\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta \cos \phi$	 $\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta \sin \phi$	 $\frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$
$Y_{1(-1)}$	 $-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta \cos \phi$	 $\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta \sin \phi$	 $\frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$

Tabulka 2.2: Prostorové znázornění reálné a imaginární části kulových funkcí a druhé mocniny jejich absolutní hodnoty pro nízká kvantová čísla  $l, m$ .



Obrázek 2.5: Znázornění sférické části hustoty pravděpodobnosti pro kvantové číslo  $l = 1$ .

### 2.3.2 Radiální část vlnové funkce

Radiální část vlnové funkce udává, jak se vlnová funkce mění v závislosti na vzdálenosti od počátku. Můžeme ji zapsat jako součin přidruženého Laguerrova polynomu a klesající reálné exponenciály a výrazu obsahujícího výraz  $r^l$

$$R(r) = \widetilde{N}_{nl} \left( \frac{2r}{na} \right)^l L_{nl} \left( \frac{2r}{na} \right) e^{-\frac{r}{na}}. \quad (2.71)$$

Ze vztahu (2.71) vidíme, že pro velká  $r$  převáží exponenciální část nad polynomiální částí a funkce bude exponenciálně klesat k nule. Naopak pro malá  $r$  bude podstatný průběh Laguerrova polynomu a výrazu  $\left( \frac{2r}{na} \right)^l$ .

#### Přidružené Laguerrovy polynomy

Pro ilustraci uvádíme tvar několika přidružených Laguerrových polynomů vypočtených podle definičního vztahu (2.60).

$$\begin{array}{ll}
 L_0^0(\xi) = 1 & L_0^1(\xi) = 1 \\
 L_1^0(\xi) = -\xi + 1 & L_1^1(\xi) = -2\xi + 4 \\
 L_2^0(\xi) = \xi^2 - 4\xi + 2 & L_2^1(\xi) = 3\xi^2 + 18\xi - 18 \\
 L_3^0(\xi) = -\xi^3 + 9\xi^2 - 18\xi + 6 & \vdots
 \end{array}$$

Pomocí nich můžeme určit průběh radiálních vlnových funkcí pro nízká kvantová čísla  $n, l$ ,

$$\begin{aligned} R_{10} &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}, & R_{30} &= \frac{1}{3\sqrt{3\pi a^3}} \left(1 - \frac{2}{3a}r + \frac{2}{27a^2}r^2\right) e^{-\frac{r}{3a}}, \\ R_{20} &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}, & R_{31} &= \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{3\pi a^3}} \frac{r}{a} \left(1 - \frac{1}{6a}r\right) e^{-\frac{r}{3a}}, \\ R_{21} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}}, & R_{32} &= \frac{1}{81\sqrt{6\pi a^3}} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a}}. \end{aligned}$$

### Průběh radiální části hustoty pravděpodobnosti

Více než průběh samotné radiální části vlnové funkce nás bude zajímat průběh její druhé mocniny, tedy radiální části hustoty pravděpodobnosti  $|R_{nl}|^2$ . Poďíváme se nyní na to, kolik má nulových bodů a lokálních maxim.

Reálná exponenciála  $e^{-\frac{r}{na}}$  je kladná na celém  $\mathbb{R}$ , proto počet nulových bodů ovlivňuje pouze polynomiální část obsahující  $\left(\frac{2r}{na}\right)^l$  a přidružený Laguerrovův polynom  $L_{nl}\left(\frac{2r}{na}\right)$ .

Člen  $\left(\frac{2r}{na}\right)^l$  má nulový bod pouze v počátku pro stavy s kvantovým číslem  $l \neq 0$ . Tyto stavy tak mají v počátku nulovou hustotu pravděpodobnosti, zatímco pro stavy s kvantovým číslem  $l = 0$  má radiální část hustoty pravděpodobnosti v počátku maximum, jak ukazuje obrázek 2.6.<sup>11</sup>

Dalšími nulovými body přispívají přidružené Laguerrovy polynomy svými kořeny. Přidružený Laguerrovův polynom stupně  $k$  má právě  $k$  různých reálných kořenů, Laguerrovy polynomy vystupující ve vlnové funkci jsou stupně  $n - l - 1$ , mají tedy  $n - l - 1$  nulových bodů. Počet maxim radiální části hustoty pravděpodobnosti tak je  $n - l$  (počítáno včetně maxima v  $r = 0$  pro  $l = 0$ ).

### Radiální vs. bodová hustota pravděpodobnosti

Pozorovali jsme, že pro stavy s kvantovým číslem  $l = 0$  má radiální část hustoty pravděpodobnosti maximum v počátku, tedy ve středu atomu. Mohlo by se zdát, že je tedy nejpravděpodobnější najít elektron ve středu atomu, tedy v jádře a jeho blízkosti, což neodpovídá realitě.

Musíme si ale dát pozor, jestli nás zajímá *bodová hustota pravděpodobnosti* (resp. její radiální část), což je pravděpodobnost, že elektron nalezneme v nějakém konkrétním místě o souřadnicích  $(r, \theta, \phi)$ , nebo *radiální hustota pravděpodobnosti*, což je pravděpodobnost, že elektron nalezneme v určité vzdálenosti od středu atomu.

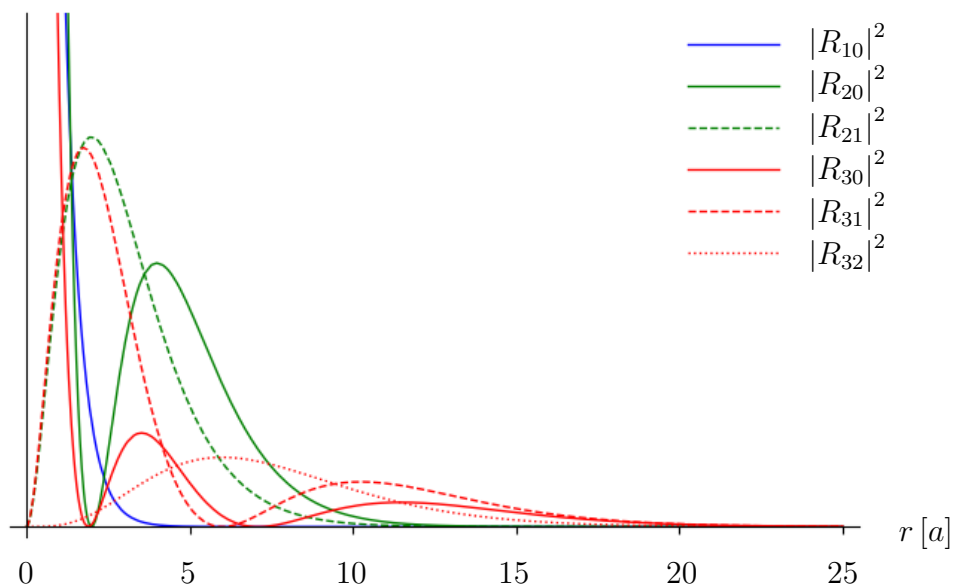
Bodovou hustotu pravděpodobnosti spočítáme jako druhou mocninu absolutní hodnoty vlnové funkce

$$\rho(r, \theta, \phi) = |\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 = |R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)|^2, \quad (2.72)$$

radiální část bodové hustoty pravděpodobnosti je tedy

$$|R_{nl}(r)|^2. \quad (2.73)$$

<sup>11</sup>Měřítka na svislé ose je pro přehlednost pro jednotlivé funkce různé, aby byl patrný jejich průběh. Funkční hodnota funkcí pro  $l = 0$  je v počátku tak velká, že ji nelze v obrázku zachytit, aby byl zároveň patrný průběh dalších lokálních maxim, je ale konečná.



Obrázek 2.6: Druhá mocnina radiální části vlnové funkce  $|R_{nl}|^2$  pro nízká kvantová čísla  $n, l$ .

Radiální hustotu pravděpodobnosti  $\rho_{\text{rad}}(r)$  spočítáme tak, že „posčítáme pravděpodobnosti“ nalezení elektronu ve všech místech se stejnou vzdáleností od počátku, tj. zintegrujeme bodovou hustotu pravděpodobnosti přes povrch koule s požadovaným poloměrem  $r$

$$\begin{aligned}
 \rho_{\text{rad}}(r) &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |R_{nl}(r)|^2 |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi = & (2.74) \\
 &= r^2 |R_{nl}(r)|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \\
 &= r^2 |R_{nl}(r)|^2 .
 \end{aligned}$$

Při výpočtu jsme využili toho, že jsou kulové funkce normované, takže integrál na druhém řádku je roven jedné. Vidíme, že se v radiální hustotě pravděpodobnosti objevil další faktor, a to kvadratický výraz  $r^2$ , který roste stejně rychle jako povrch koule.

Hledáme-li elektron na povrchu koule s velmi malým poloměrem, tj.  $r \approx 0$ , faktor  $r^2$  způsobí, že bude  $\rho_{\text{rad}}(r) \approx 0$ . Ve velmi malých vzdálenostech od středu atomu tak elektron nalezneme jen s malou pravděpodobností. Pokud hledáme elektron na povrchu koule s velkým poloměrem, exponenciální pokles výrazu  $e^{-\frac{2r}{na}}$  v  $R_{nl}(r)$  převáží nad Laguerrovým polynomem i nad faktorem  $r^2$ , takže pravděpodobnost nalezení elektronu ve velkých vzdálenostech je také velmi malá.

Elektron tedy s určitou nezanedbatelnou pravděpodobností můžeme nalézt jen v určitém intervalu vzdáleností.

V prostředním sloupečku grafů v tabulce 2.3 je radiální část bodové hustoty pravděpodobnosti vykreslena modře a radiální hustota pravděpodobnosti zeleně (měřítko na svislé ose není pro obě funkce stejné, aby byl dobře viditelný průběh obou funkcí). Na prvních dvou obrázcích vidíme, že i když má bodová hustota pravděpodobnosti v počátku maximum, radiální hustota pravděpodobnosti je v počátku skutečně nulová a ve velmi malých vzdálenostech relativně malá.

### 2.3.3 Tvar orbitalů atomu vodíku

Již víme, jak vypadá sférická i radiální část vlnové funkce a z nich vypočtené hustoty pravděpodobnosti, můžeme je tedy složit dohromady a podívat se na průběh celkové hustoty pravděpodobnosti v prostoru, tedy na tvar orbitalů atomu vodíku.

V tabulce 2.3 je v prvním sloupci v polárním grafu červeně zobrazena sférická část hustoty pravděpodobnosti, tj. druhá mocnina absolutní hodnoty kulových funkcí, v řezu svislou rovinou. V prostředním sloupci jsou grafy radiální části bodové hustoty pravděpodobnosti (modře) a radiální hustoty pravděpodobnosti (zeleně). Celková bodová hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v daném místě, zkonstruovaná pomocí grafů sférické a radiální části bodové hustoty pravděpodobnosti, je znázorněna ve třetím sloupci tabulky (v řezu rovinou obsahující svislou osu  $z$ ). Pro znázornění celkové bodové hustoty pravděpodobnosti je použita barevná škála s různou intenzitou červené barvy. Jasně červená barva znamená vysokou hodnotu hustoty pravděpodobnosti, tmavší odstíny červené nižší hustotu pravděpodobnosti a černá nulovou.<sup>12</sup>

Obrázky na prvních dvou řádcích znázorňují hustotu pravděpodobnosti pro stavy  $(1, 0, 0)$  a  $(3, 0, 0)$ . Tyto stavy mají stejná kvantová čísla  $l = 0$ ,  $m = 0$  a liší se pouze v hlavním kvantovém čísle  $n$ . Protože sférická část hustoty pravděpodobnosti závisí pouze na kvantových číslech  $l$ ,  $m$ , mají stavy se stejnými kvantovými čísly  $l$  a  $m$  stejný úhlový tvar. V případě stavů s  $l = 0$  jde o kulový tvar.

Radiální část hustoty pravděpodobnosti závisí na kvantových číslech  $n$ ,  $l$ , která určují počet jejích maxim a nulových bodů. Jak jsme viděli v sekci věnované Laguerrovým polynomům, počet nulových bodů radiální hustoty pravděpodobnosti je  $n - l - 1$  a počet jejích maxim je  $n - l$ . Maxima radiální části hustoty pravděpodobnosti odpovídají na obrázku celkové hustoty pravděpodobnosti kulovým vrstvám s vysokou hustotou pravděpodobnosti (místa s jasně červenou, příp. bílou barvou) a jsou navzájem oddělena kulovými plochami s nulovou hustotou pravděpodobnosti (místa s černou barvou), které odpovídají nulovým bodům radiální části hustoty pravděpodobnosti. Kvantová čísla  $n$  a  $l$  tak vlastně udávají počet „vrstev“ orbitalu.

Na dalších obrázcích je hustota pravděpodobnosti pro jiné kombinace kvantových čísel. Pro stavy s vedlejším kvantovým číslem  $l \neq 0$  už tvar orbitalu není sférický symetrický, ale má složitější tvar.

#### Poznámka o popisu orbitalů v chemii

S popisem orbitalů se často setkáme také v chemii. Popis a konvence, které používají chemici, se v několika věcech liší od těch fyzikálních, proto je třeba je mít při nahlížení do učebnic chemie na paměti.

1. V chemii bývá zvykem orbitaly označovat písmeny podle vedlejšího kvantového čísla  $l$ . Orbitaly s kvantovým číslem  $l = 0, 1, 2, 3, 4$  se tak po řadě nazývají orbitaly s, p, d, f, g.

<sup>12</sup>Měřítko barevné škály není na všech obrázcích stejné, bílá místa znamenají vyšší hodnotu hustoty pravděpodobnosti než zobrazuje barevná škála, která byla nastavena tak, aby byla dobře viditelná i místa s nízkou hustotou pravděpodobnosti.



2. V učebnicích chemie bývá často vyobrazována pouze sférická část hustoty pravděpodobnosti, musíme dát pozor na záměnu s celkovou hustotou pravděpodobnosti.
3. Při nahlédnutí do učebnic chemie můžeme zjistit, že tvar sférické části hustoty pravděpodobnosti je jiný než s jakým jsme dosud pracovali. Díky tomu, že stacionární stavy atomu vodíku, které se liší pouze kvantovými čísly  $l$  a  $m$  (tj. mají stejné hlavní kvantové číslo  $n$ ), mají stejnou energii. Můžeme proto vytvořit jejich lineární kombinaci, která bude také stacionárním stavem (tj. bude se také jednat o stav s ostrou hodnotou energie). Můžeme tak přejít k jiné bázi stacionárních funkcí. Ve fyzice je výhodné pracovat s funkcemi, které jsou vlastními funkcemi operátoru  $\hat{L}_z$ . V chemii se pro popis chemické vazby lépe hodí funkce, které mají „stejný tvar“ a různou prostorovou orientaci.

### 2.3.4 Kvantová čísla

Shrňme nyní ještě jednou význam kvantových čísel  $n$ ,  $l$ ,  $m$ , která se postupně objevovala v průběhu řešení atomu vodíku.

Kvantová čísla slouží k očíslování stacionárních stavů elektronu v atomu vodíku. Každá trojice kvantových čísel  $(n, l, m)$  tak odpovídá jednomu stavu, který je popsán vlnovou funkcí  $\psi_{nlm}$  odvozenou výše. Tento způsob volby kvantových čísel je všeobecně používaný, není však jediný možný. Stavy by bylo možné seřadit za sebe (např. podle energie) a očíslovat je pomocí jediného kvantového čísla, ale vztahy pro energii a ostatní vlastní čísla by pak byly mnohem komplikovanější.

#### Hlavní kvantové číslo $n$

Hlavní kvantové číslo  $n$  jsme dostali při řešení stacionární Schrödingerovy rovnice z podmínky na normovatelnost řešení. Určuje energii stavu<sup>13</sup> a jeho hodnota ovlivňuje radiální část vlnové funkce, ne však úhlovou část. Může být rovno libovolnému přirozenému číslu  $n \in \mathbb{N}$ .

Spolu s vedlejším kvantovým číslem určuje také „vrstevnatost“ orbitalu, tedy počet maxim radiální části vlnové funkce.

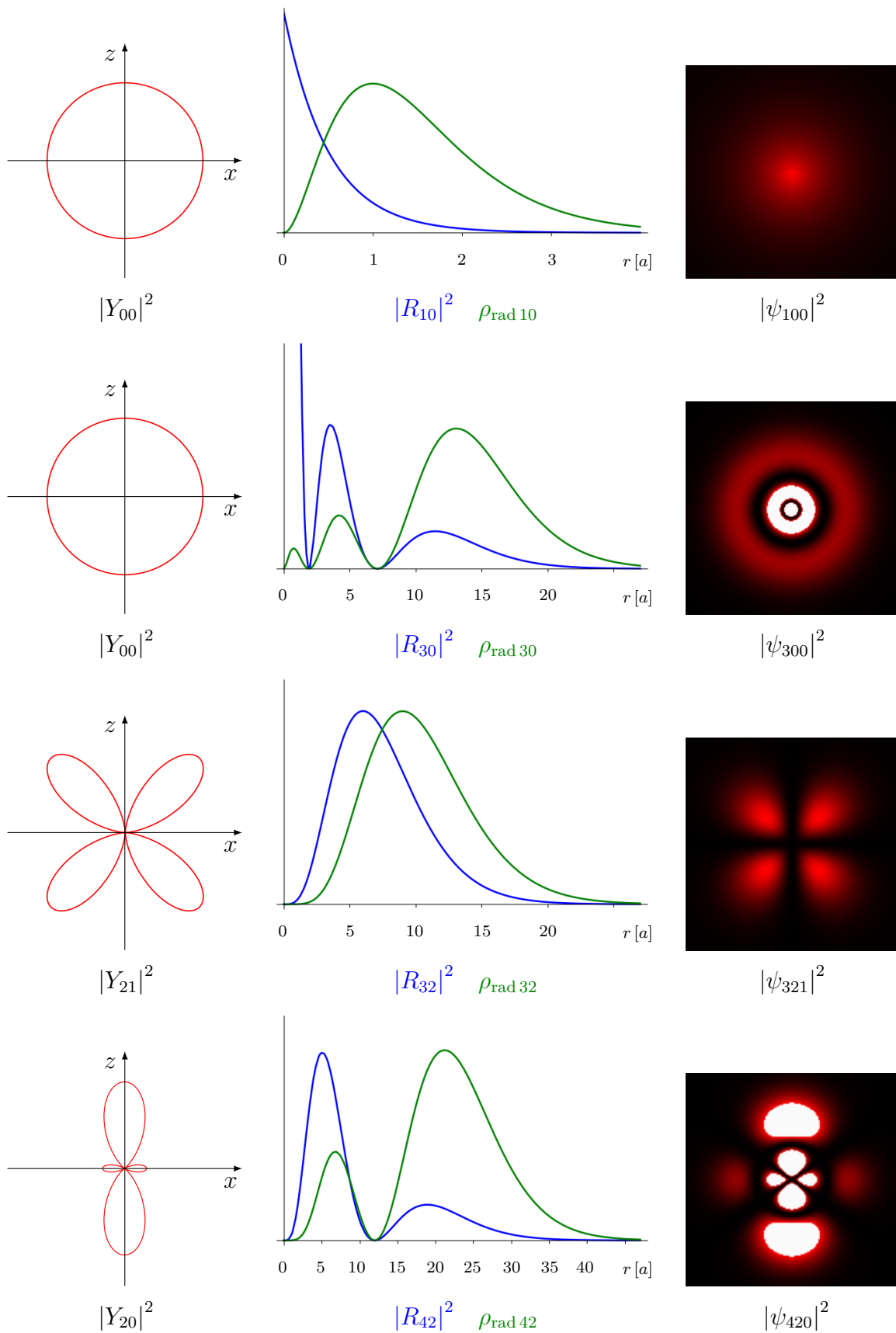
#### Vedlejší kvantové číslo $l$

Vedlejší kvantové číslo  $l$  opět souvisí požadavkem normovatelnosti, tentokrát řešení rovnice pro vlastní čísla operátoru  $\hat{L}^2$ . Povolené hodnoty vedlejšího kvantového čísla jsou přirozená čísla včetně nuly,  $l \in \mathbb{N}_0$ , pro které platí podmínka  $l < n$ . Spoluurčuje tvar jak úhlové, tak i radiální části vlnové funkce.

#### Magnetické kvantové číslo $m$

Magnetické kvantové číslo souvisí s požadavkem na  $2\pi$ -periodičnost vlnové funkce v proměnné  $\phi$  při řešení rovnice pro vlastní čísla operátoru  $\hat{L}_z$ . Povolené

<sup>13</sup>To, že energie stavu  $E_n$  závisí pouze na hlavním kvantovém čísle, je specifické pro atom vodíku. Tento jev bývá označován jako tzv. *náhodná degenerace*. Pro jiné sféricky symetrické problémy, které mají stejné řešení úhlové části, závisí energie na hlavním i vedlejším kvantovém čísle  $n$  a  $l$ .



Tabulka 2.3: Znázornění sférické části bodové hustoty pravděpodobnosti (vlevo), radiální části bodové hustoty pravděpodobnosti (uprostřed, modře), radiální hustoty pravděpodobnosti (uprostřed, zeleně) a celkové bodové hustoty pravděpodobnosti (vpravo) pro několik vybraných stacionárních stavů atomu vodíku.

hodnoty pro magnetické kvantové číslo jsou celá čísla,  $m \in \mathbb{Z}$ , pro něž platí podmínka  $|m| \leq l$ .

Určuje tvar sférické části vlnové funkce, ne však radiální části.

**Úkol 2.7** Jaký je stupeň degenerace  $n$ -té energetické hladiny atomu vodíku?

**Řešení:** Degenerace energetické hladiny znamená, že různé vlastní stavy mají stejnou energii. Počet různých vlastních stavů se stejnou energií označujeme jako tzv. *stupeň degenerace*  $g_n$ . Energie stavu atomu vodíku je určena hlavním kvantovým číslem  $n$ , ale nezávisí na vedlejší kvantovém čísle  $l$  ani na magnetickém kvantovém čísle  $m$ . To znamená, že dva stavy, které mají stejné hlavní kvantové číslo  $n$ , mají stejnou energii, i když se liší v kvantových číslech  $l$  a  $m$ . Naše otázka je tedy stejná, jako kdybychom se ptali, kolik různých stavů atomu vodíku existuje pro dané  $n$ .

Pro pevné  $n$  může vedlejší kvantové číslo nabývat hodnot  $0, 1, 2, \dots, (n-1)$  a pro každé vedlejší kvantové číslo  $l$  existuje  $2l+1$  možných hodnot magnetického kvantového čísla  $m$  (protože magnetické kvantové číslo může nabývat hodnot  $-l, \dots, 0, \dots, l$ ). Chceme-li zjistit, kolik existuje celkem možných stavů pro pevné  $n$ , musíme sečíst počet možností kvantového čísla  $m$  pro všechna možná  $l$ , což můžeme zapsat jako

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1). \quad (2.75)$$

Jedná se o aritmetickou posloupnost, jejíž součet je

$$g_n = \frac{n}{2}(1 + 2(n-1) + 1) = n^2. \quad (2.76)$$

Zjistili jsme tedy, že stupeň degenerace každé energetické hladiny je  $n^2$ .

□

## 2.4 Další přiblížení modelu atomu vodíku

Pojďme se nyní znovu podívat na předpoklady a zjednodušení, které jsme v průběhu řešení atomu vodíku přijali a zamyslet se nad tím, jaké další efekty bychom mohli brát v úvahu, kdybychom chtěli naše řešení zpřesňovat.

Připomeňme znovu, že jsme se celou dobu zabývali *stacionárními stavy* atomu vodíku, tedy stavy s ostrou hodnotou energie. Také tvar orbitalů atomu vodíku jsme si znázorňovali pouze pro tyto stavy. Pokud bychom chtěli zjišťovat, jak je to s tvarem orbitalů pro nestacionární stavy atomu vodíku, museli bychom vzít řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice a průběh hustoty pravděpodobnosti vypočítat z něj. Pozor, nejedná se o součet hustot pravděpodobností (orbitalů). Navíc hustota pravděpodobnosti nestacionárních stavů není na rozdíl od stacionárních stavů v čase konstantní, tvar orbitalů nestacionárních stavů se tak s časem vyvíjí.

## Redukovaná hmotnost

První zpřesnění, které můžeme do našeho řešení snadno zahrnout, je nahrazení hmotnosti elektronu redukovanou hmotností, kterou jsme určili v úkolu 1. Tato oprava je v řádu desetiny promile, tedy  $10^{-4}$ .

## Spin elektronu

V našich úvahách jsme dosud neuvažovali spin elektronu. Elektron má dvě možné hodnoty průmětu spinu  $\pm \frac{\hbar}{2}$ , každý stav popsany trojicí kvantových čísel  $(n, l, m)$  tak můžeme odlišit podle toho, jestli má elektron „spin nahoru“ nebo „spin dolů.“ Zavádíme proto další kvantové číslo, tzv. *spinové kvantové číslo*  $m_s$ , které popisuje průmět vnitřního momentu hybnosti elektronu – spinu. Nabývá dvou různých hodnot  $m_s = \pm 1$ .

Naproti tomu magnetické kvantové číslo  $m$  popisuje průmět momentu hybnosti (označovaného jako *orbitální moment hybnosti*), který souvisí s „pohybem“ elektronu v poli centrální síly.

Při přidání spinu tak musíme pro jednoznačné rozlišení stavů použít čtveřici čísel  $(n, l, m, m_s)$ . Stupeň degenerace energetických hladin atomu vodíku se spinem tak bude  $2n^2$ .

## Spin-orbitální interakce a relativistické efekty

Z experimentů vyplývá, že hodnota energie dvou stavů lišících se pouze spinovým kvantovým číslem se mírně liší (řádově asi o  $10^{-4}$  eV). V porovnání s rozdílem energie základního stavu a excitovaných stavů (který se pohybuje v desítkách eV) je to rozdíl malý, nicméně měřitelný.

K tomuto rozštěpení energetické hladiny přispívá interakce orbitálního momentu hybnosti s vnitřním momentem hybnosti elektronu, tzv. *spin-orbitální interakce*. Orbitální moment hybnosti vytváří uvnitř atomu magnetické pole,<sup>14</sup> se kterým interaguje spin elektronu. Vznik tohoto magnetického pole si můžeme představit dvěma způsoby, z pohledu jádra nebo z pohledu elektronu. V prvním případě se elektron pohybuje v elektrickém poli jádra a jakožto nabitá částice vytváří magnetické pole. Z pohledu elektronu vidíme, že se kolem něj pohybuje kladně nabitý proton a vytváří proudovou smyčku, která generuje magnetické pole. Energie stavu elektronu pak bude záviset na orientaci jeho spinu v tomto magnetickém poli.<sup>15</sup>

Další efekty, které musíme vzít v úvahu, souvisejí s relativistickým chováním částic. Místo klasického vztahu pro kinetickou energii bychom měli použít relativistický vztah pro energii

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}. \quad (2.77)$$

<sup>14</sup>Jde opravdu o „vnitřní“ pole vytvořené atomem samotným, nikoli o vnější magnetické pole, do kterého by atom mohl být vložen, jak uvidíme u Zeemanova jevu v 7.

<sup>15</sup>Pomocí klasické představy proudové smyčky můžeme pomocí Biotova-Savartova zákona odhadnout velikost tohoto magnetického pole přibližně na 2 T.

Korekce energetických hladin, které získáme tímto způsobem, jsou řádu  $10^{-4}$  eV, tedy stejného řádu jako příspěvek spin-orbitální interakce.

Spojení obou korekcí dohromady se říká tzv. *jemná struktura spektra atomu vodíku*. Při započtení těchto korekcí se ve vztahu pro energii objevují kromě hlavního kvantového čísla  $n$  také další kvantová čísla a degenerace energetických hladin vůči  $n$  a  $l$  tak mizí.

## Spin jádra

Dalším jevem, který jen stručně zmíníme je tzv. *spin-spinová interakce*, kdy budeme uvažovat i spin jádra. Máme tak vlastně dvoučásticový systém, kdy spin jádra interaguje se spinem elektronu. Korekce na energie, které takto získáme, jsou přibližně řádu  $10^{-6}$  eV, což je výrazně méně než korekce pro jemnou strukturu atomu vodíku. Proto bývá tato korekce označována jako tzv. *hyperjemná struktura atomu vodíku* nebo *hyperjemné rozštěpení*.

## Průběh potenciálu

Drobné nepřesnosti jsme se dopustili, když jsme předpokládali, že potenciál jádra můžeme popisovat pomocí coulombického potenciálu bodového náboje, který má průběh  $V(r) \sim \frac{1}{r}$ . Ve skutečnosti jádro není bodové, ale má rozměr asi  $10^{-15}$  m, měli bychom tedy uvažovat průběh potenciálu jako u homogenně nabitě koule. Oprava energie, kterou takto dostaneme, je v řádu  $10^{-9}$  eV (viz úloha č. 2299 ve Sbírce řešených úloh), což je při běžné přesnosti měření zanedbatelné, ale při přesném měření se tento rozdíl projeví.

Navíc interakce mezi elektronem a jádrem není čistě elektrostatická (zanedbali jsme např. gravitační přitahování nebo krátkodosahovou slabou interakci, která má dosah cca  $10^{-17}$  m). Tato zanedbání ale v porovnání s ostatními opravdu nejsou významná.



# 3. O orbitalech atomu vodíku – Pracovní list pro SŠ seminář

V rámci této diplomové práce byl navržen a zrealizován seminář věnovaný problematice orbitalů. Pro seminář byl vytvořen pracovní list s názvem *O orbitalech atomu vodíku*, viz příloha A. Seminář je určen studentům<sup>1</sup> střední školy, kteří se již setkali s pojmem atomový orbital (např. v chemii), a má rozsah dvou vyučovacích hodin, tj. 90 minut.

Tento seminář by měl vést k naplnění následujících cílů:

1. Studenti se *seznámí* s odlišností popisu stavu částice v klasické a kvantové mechanice.
2. Studenti se *seznámí* s pojmem hustota pravděpodobnosti a se znázorněním její úhlové a radiální části pomocí grafů.
3. Studenti *aplikují* znalost hustoty pravděpodobnosti při práci s grafy:
  - Studenti na základě grafů úhlové a radiální části hustoty pravděpodobnosti *načrtnou* průběh celkové hustoty pravděpodobnosti (tj. výsledný tvar orbitalu) pro orbitaly s, p, d.
  - Studenti na základě celkové hustoty pravděpodobnosti *odhadnou* průběh radiální a úhlové části hustoty pravděpodobnosti.

Seminář je rozdělen do dvou částí, z nichž každá by měla trvat asi polovinu vyhrazeného času. První část semináře je přípravná a zaměřuje se na naplnění prvního a druhého cíle, studenti se v ní seznamují s pojmem hustota pravděpodobnosti pomocí několika fyzikálních systémů.

Druhá část semináře se již soustředí na popis orbitalů atomu vodíku a na naplnění třetího cíle. Studenti se zde seznamují se znázorněním úhlové části hustoty pravděpodobnosti a části hustoty pravděpodobnosti závislé na vzdálenosti od jádra pomocí různých typů grafů a na základě těchto grafů sestavují průběh celkové hustoty pravděpodobnosti, pomocí níž si mohou představit prostorové tvary orbitalů atomu vodíku.

V průběhu semináře se střídá výklad učitele, diskuse se studenty a samostatné či skupinové řešení úkolů. V každé části semináře studenti řeší sérii několika úkolů, které jim pomohou dané problematice lépe porozumět. Některé úkoly jsou označeny hvězdičkou jako volitelné, lze je zařadit či vynechat podle potřeby nebo je zadat pouze rychlejším studentům.

Ústředním materiálem, s nímž studenti během semináře pracují, je pracovní list se zadáním úkolů a místem pro řešení. Pracovní list je doplněn také průvodním textem, a může tak soužit jako studijní materiál k semináři. V příloze této práce je také zkrácený pracovní list bez průvodního textu, pouze se zadáním úkolů.

<sup>1</sup>V celé této práci je záměrně použito označení *studenti* místo *žáci*, což odpovídá označení běžně používanému ve školách učiteli i žáky.

## 3.1 Průběh semináře

Následující text slouží jako průvodce seminářem pro učitele. Text vznikl na základě pilotáže semináře, zkušeností autorky s tímto tématem a připomínek učitelů z praxe. Učitelé zde také naleznou autorské řešení úkolů z pracovního listu a ukázkou studentských řešení.

### Časové rozložení semináře

V tabulce 3.1 je uvedeno doporučené časové rozložení semináře. Podle schopností studentů mohou jednotlivé části semináře trvat různě dlouho, doporučuji ale držet se rozdělení semináře na dva přibližně stejně dlouhé celky. Některé části a úkoly lze dle časových možností vynechat, jiným se naopak lze věnovat podrobněji.

5 min	Úvod a úvodní otázka „Co je orbital?“	} max. 45 min
10 min	Rozdíl v popisu stavu částice v klasické a kvantové mechanice	
20 min	Závaží na pružině	
10 min	Komár v místnosti	
10 min	Orbitaly atomu vodíku: Úhlová část hustoty pravděpodobnosti	} max. 45 min
5 min	Část hustoty pravděpodobnosti závislá na vzdálenosti od jádra	
15 min	Celková hustota pravděpodobnosti	
10 min	Prostorová představa orbitalů, chemická báze	
5 min	Závěr, shrnutí a závěrečná otázka „Co je orbital?“	

Tabulka 3.1: Časové rozložení semináře.

### Pomůcky

Každý student bude potřebovat pracovní list *O orbitalech atomu vodíku* v rozšířené či zkrácené verzi a pastelky či tužky pro kreslení hustoty pravděpodobnosti. Učitel bude potřebovat projektor a počítač s apletem *Klasický oscilátor* (ke stažení z [18]) a programem *Orbitaly* (dostupný z [25]).

#### 3.1.1 Úvod semináře

Na začátku povídání o orbitalech si studenti v úkolu 1 připomenou, co již o orbitalech vědí z chemie či z fyziky a vlastními slovy napíší, co je podle nich orbital. Několik studentů může své odpovědi říct nahlas. Tato počáteční představa o pojmu orbital slouží jako odrazový můstek pro celý seminář, během kterého se studenti setkají s detailnějším pohledem na problematiku orbitalů a mohou na jeho základě svou představu o orbitalech změnit, poupravit nebo si ponechat představu původní. Odpovědi v této fázi tedy není potřeba hodnotit jako správné či špatné, slouží spíše jako pracovní varianty, ke kterým se studenti vrátí na konci semináře.



Typickými studentskými odpověďmi, které se objevovaly při pilotáži, jsou například

- „Místo, do kterého se ukládají a uspořádávají elektrony určitého prvku.“
- „Místo nebo energetická vrstva, ve které se s největší pravděpodobností vyskytují elektrony.“
- „Místo v elektronovém obalu, kde se s největší pravděpodobností nacházejí elektrony.“
- „Obal, ve kterém se nacházejí elektrony.“
- „Část atomu, kde se nacházejí elektrony.“

### 3.1.2 Jak popsat pohyb částice aneb kde je elektron?

V této části semináře seznámíme studenty s některými rozdíly v chování částic v klasické mechanice a v kvantové mechanice, které jsou podstatné pro pochopení významu orbitalů a jejich popis. Tyto odlišnosti demonstrujeme na myšlenkovém experimentu s kuličkami a elektrony, který je popsán níže. Pomocí tohoto experimentu dospějeme spolu se studenty k tomu, že na rozdíl od klasického popisu pohybu částice pomocí trajektorie a souřadnic polohy a rychlosti musíme v kvantové mechanice používat popis pomocí pravděpodobnosti.

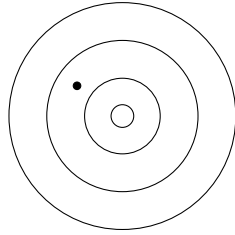
Cílem tohoto semináře není podat podrobný přehled o odlišnostech kvantové mechaniky (což by samo o sobě vydalo na několik samostatných seminářů), jde spíše o první seznámení se s touto problematikou. Proto této části věnujeme jen poměrně krátký čas, ne více než 5–10 minut.

#### Experiment s kuličkami

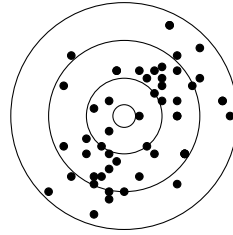
V klasické mechanice popisujeme pohyb těles pomocí jejich souřadnic a rychlosti, pro každé těleso tak můžeme nakreslit trajektorii jeho pohybu. Na základě znalosti počáteční polohy a rychlosti kuličky a sil, které na ni působí, můžeme jednoznačně předpovědět, jak se bude kulička pohybovat a kam dopadne, pokud ji vystřelíme do terče.

Můžeme studenty vyzvat, aby si představili, že je ve třídě myšlené dělo, do kterého lze vložit kuličku (tenisák, míček, . . .) a vystřelit ji na terč (ten si můžeme představovat např. na stěně třídy). Kulička dopadne na nějaké místo v terči. Pak se můžeme studentů zeptat, kam dopadne další kulička, když bude dělo nastavené úplně stejně – tj kulička začne ve stejném místě, bude jí udělena stejná rychlost a budou na ni působit stejné síly (tj. bude mít stejné počáteční podmínky). Studenti pravděpodobně odpoví, že do téhož místa jako první kulička.

Můžeme se pak dále zeptat, jak by vypadaly stopy po kuličkách v terči, kdyby bylo stejným způsobem vystřeleno sto stejných kuliček. V terči by byla pouze jedna stopa, protože všechny kuličky by dopadly do stejného místa. (Zde je potřeba zdůraznit, že předpokládáme, že naše dělo míří zcela přesně, tedy že nepřesnosti měření nebereme v našem experimentu v úvahu.) Výsledek tohoto experimentu je znázorněn na obrázku 3.1 vlevo.



(a) Terč po vystřelení sta klasických kuliček se zcela stejnými počátečními podmínkami.



(b) Terč po vystřelení sta „stejně připravených“ elektronů.

Obrázek 3.1: Myšlenkový experiment s kuličkami a elektrony.

## Experiment s elektrony

Sdělíme studentům, že stejný experiment nyní provedeme s elektrony, tedy s objekty velmi malými, které podléhají zákonům kvantové mechaniky. V tomto experimentu tedy budeme „střílet“ z děla elektrony. Je potřeba studenty upozornit, že u elektronu nemůžeme znát zároveň jeho polohu a rychlost (kvůli relacím neurčitosti), proto není možné elektronům udělit přesnou počáteční polohu a rychlost zároveň, jako tomu bylo u klasických kuliček. Stejně počáteční podmínky pro elektrony zajistíme tak, že je na začátku uvedeme do tzv. *stejného kvantového stavu*. Můžeme pak mluvit o „stejně připravených“ elektronech.

Řekneme studentům, že do terče „vystřelíme“ první elektronu, a ten v terči zanechá stopu na nějakém místě. Pak se studentů zeptáme, kam podle nich dopadne další elektron, který bude na začátku ve stejném kvantovém stavu jako ten první. Studenti často odpovídají, že dopadne do stejného místa jako první elektron. Bývá pro ně překvapivé, že druhý elektron může dopadnout na úplně jiné místo než ten první.

Zde je potřeba studenty konfrontovat s výsledkem experimentu, který odporuje našim klasickým představám: *V případě elektronů, které byly na začátku ve stejném kvantovém stavu, může dopadnout experiment pro každý elektron jinak, do výsledku experimentu zasahuje náhoda. Každý elektron tak může dopadnout do jiného místa terče.*

Podle časových možností a schopností studentů je možné studenty blíže seznámit s tzv. superpozicí kvantových stavů, která je popsána níže, nebo je možné s tímto výsledkem dále pracovat pouze jako s faktem.

Po tomto sdělení se studentů opět zeptáme, jak by vypadal terč, po vystřelení sta „stejně připravených“ elektronů. Studenti většinou dojdou k tomu, že v terči budou stopy po elektronech rozestry náhodně, v některých místech mohou být hustěji u sebe, v jiných řidčeji, některé stopy se mohou překrývat, jak ukazuje obrázek 3.1 vpravo.

Položíme studentům otázku, jestli by na základě předchozích experimentů uměli předpovědět, kam by dopadl další „stejně připravený“ elektron. Studenti by měli dojít k tomu, že s jistotou výsledek experimentu předpovědět nelze, protože v něm hraje roli náhoda. Při předchozích experimentech jsme si mohli všimnout, že ze vzorku sta elektronů na některá místa v terči elektrony dopadaly častěji (stopy jsou tam hustěji u sebe), na některá naopak méně často (nejsou tam skoro žádné stopy). Elektrony v tomto kvantovém stavu mají větší pravdě-

podobnost, že dopadnou do míst terče s více stopami než do míst s méně stopami.

Nemůžeme tedy předpovědět, kam přesně daný elektron dopadne, ale pouze odhadnout pravděpodobnost, s jakou dopadne do daného místa. Čím více experimentů bychom měli k dispozici, tím by byl náš odhad pravděpodobnosti přesnější. V kvantové mechanice proto používáme popis pomocí pravděpodobnosti.

V předchozích experimentech s kuličkami a elektrony jsme používali slovní spojení jako „vystřelíme elektron,“ „elektron dopadne na terč,“ apod. Je potřeba si uvědomit, že jde o zjednodušený myšlenkový experiment, jehož cílem je zdůraznit některé odlišnosti chování klasických a kvantových objektů. Musíme mít stále na paměti, že elektron se skutečně nechová jako kulička, kterou bychom mohli vložit do děla, pak ji vystřelit, sledovat její trajektorii říci, kudy letěla, než jsme se podívali, kam dopadla.

„Vystřelením elektronu z děla“ zde máme na mysli pouze připravení elektronu v určitém kvantovém stavu, „dopadnutím elektronu do terče“ máme na mysli změření polohy elektronu.

## Teoretické pozadí experimentu

V experimentu s kuličkami a elektrony hrálo roli několik odlišností kvantové mechaniky a klasické mechaniky. V následujících několika odstavcích tyto odlišnosti krátce okomentujeme, již zcela nad rámec obsahu semináře, pouze pro potřeby učitele či zájemce z řad studentů. Jedná se o princip superpozice, problematiku měření a relace neurčitosti.

**Princip superpozice** Princip superpozice říká, že může-li se částice ve dvou různých stavech, pak se může nacházet také ve stavu, který je kombinací<sup>2</sup> obou těchto stavů. Říkáme, že částice je v tzv. *superpozici stavů* nebo v tzv. *superponovaném stavu*. Každý jednotlivý stav může být v superpozici zastoupen „různou měrou.“<sup>3</sup>

Superpozici stavů si můžeme představovat jako jakousi „paletu stavů,“ ze kterých má částice „na výběr.“ Stav, který je v superpozici zastoupen „větší měrou“ si částice z palety „vybírání častěji“ než stav, který je zastoupen „menší měrou.“

Mějme například elektron, který je v takové superpozici stavů, že může zanechat v terči stopu v místě *A* s pravděpodobností 10 % nebo v místě *B* s pravděpodobností 90 %. Druhý stav je tak v superpozici zastoupen více než první stav. Když s tímto elektronem provedeme experiment a budeme pozorovat, ve kterém místě na terči zanechal stopu, dostaneme jeden ze dvou možných výsledků pokusu: „elektron dopadl na terč v místě *A*,“ nebo „elektron dopadl na terč v místě *B*.“ Kdybychom experiment provedli s velkým počtem elektronů, které byly na začátku ve zmíněném superponovaném stavu, dostali bychom pro každý elektron jeden z těchto dvou výsledků. Výsledek „elektron dopadl na terč v místě *B*“ bychom dostali v 90 % případů, zatímco výsledek „elektron dopadl na terč v místě *A*“ pouze v 10 % případů, protože tento stav byl v superpozici „méně zastoupen“ než druhý stav, tj. pravděpodobnost nalezení elektronu v místě *A* je nižší než v místě *B*.

<sup>2</sup>Matematicky jde o lineární kombinaci stavů.

<sup>3</sup>Tj. koeficienty v lineární kombinaci vektorů mohou být různé.

**Měření** Další odlišností mikrosvěta je způsob fungování experimentu neboli měření. V klasické mechanice bylo měření (např. měření délky stolu, polohy tělesa, ...) jakýmsi pasivním procesem, který probíhal „vně teorie“ a neovlivňoval vlastnosti zkoumaných objektů (při měření délky stolu se jeho délka nezmění, při zaměřování polohy tělesa se jeho poloha vlivem měření také nezmění). Naпротив tomu v kvantové mechanice je měření aktivním procesem, který ovlivňuje stav zkoumaných částic, a proto je popis měření a jeho vliv na systém důležitou součástí kvantové teorie.

Budeme-li mít částici v superponovaném stavu polohy a provedeme-li s ní experiment, ve kterém změříme její polohu, částice si náhodně „vybere“ jeden stav ze své „palety stavů“ a v něm skončí. (Při tomto „náhodném výběru“ se samozřejmě řídí tím, „jakou měrou“ je který stav zastoupen.) Kdybychom znovu měřili polohu této částice, dostali bychom už pokaždé stejný výsledek, protože částice už na své „paletě“ možných stavů nemá žádný jiný stav než ten, ve kterém skončila při provedení prvního experimentu. Takovému stavu říkáme tzv. *stav s ostrou hodnotou polohy*.

Pokud bychom vzali jinou částici ve stejném superponovaném stavu, jako byla původní částice na začátku, a provedli bychom s ní stejný experiment, mohla by si tato částice z „palety stavů“ „vybrat“ jinou možnost a experiment by tak mohl mít jiný výsledek než první experiment, přestože obě částice začínaly ve stejném superponovaném stavu.

**Relace neurčitosti** Dalším zvláštním zákonem kvantové mechaniky jsou tzv. *relace neurčitosti*, které říkají, že hodnoty některých fyzikálních veličin nemohou být přesně definovány současně. Mluvíme o tom, že je nelze současně přesně změřit. Přesněji řečeno neexistuje stav, ve kterém bychom znali hodnoty obou veličin s nulovou neurčitostí, tj. obě měly v tomto stavu ostrou hodnotu. Známým příkladem takových veličin je poloha a hybnost<sup>4</sup>. Čím přesněji známe polohu částice, tím větší musí být nepřesnost ve znalosti hybnosti částice a naopak.

Představme si, že chceme změřit polohu částice. Musíme k ní tedy vyslat nějaký signál, který se nám vrátí zpátky a podle něj poznáme, jak je částice daleko. Jako detekční signál můžeme k částici vyslat foton, který se od ní „odrazí“ a vrátí se zpět. Přesnost měření polohy částice bude přibližně srovnatelná s vlnovou délkou fotonu. Foton ale má vlastní hybnost, která závisí na jeho vlnové délce, a při interakci s částicí jí může část své hybnosti předat způsobem, který nelze z důvodu kvantové povahy interakce předpovědět. Takže sice změříme polohu částice, ale kvůli tomu, že jí foton předal část své hybnosti, můžeme znát její hybnost jen s přesností, která je srovnatelná s hybností fotonu. Mohli bychom si vzít nějaký „jemnější“ foton s menší energií a hybností, který do částice tolik „nešouchne“, aby byla neurčitost v hybnosti menší. Takový foton má ale větší vlnovou délku, takže stoupne neurčitost v měření polohy.

Je důležité si uvědomit, že tato nemožnost měřit některé veličiny současně neplyne z nedostatečnosti našich technologií, které by bylo možno zlepšovat, ale ze samé podstaty mikrosvěta.

<sup>4</sup>Resp. souřadnice polohy a odpovídající složka vektoru hybnosti, např.  $x$ ,  $p_x$ . Pro složky hybnosti  $p_y$  a  $p_z$  ze znalosti  $x$ -ové souřadnice polohy žádná omezení neplynou.

Matematicky zapisujeme relace neurčitosti jako

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{h}{4\pi},$$

kdy součin neurčitosti<sup>5</sup> polohy  $\Delta x$  a neurčitosti hybnosti  $\Delta p_x$  je vždy větší nebo roven nějaké mezní hodnotě. V tomto případě je to hodnota  $\frac{h}{4\pi}$ , kde  $h$  je *Planckova konstanta*.

Relace neurčitosti a princip měření nás nutí vzdát se v kvantové mechanice pojmu *trajektorie*, který jsme byli zvyklí používat v klasické mechanice. Trajektorii v klasické mechanice chápeme jako křivku, po které se těleso (resp. jeho hmotný střed) při svém pohybu pohybovalo určitou rychlostí. V každém bodě trajektorie tak těleso mělo jednoznačně definovanou polohu a rychlost. V kvantové mechanice částice s přesnou hodnotou polohy nemůže mít podle relací neurčitosti přesně definovanou hybnost, tedy ani rychlost. Navíc kvůli principu měření nemůžeme trajektorii částice žádným způsobem zjistit. Pokud totiž změříme polohu částice, uvedeme ji tím do stavu s ostrou hodnotou polohy. Tím jsme ale nevratně a také nepředvídatelně změnili stav dané částice. Její vývoj v čase tedy bude jiný.

Vidíme, že s klasickou představou o trajektorii a pohybu jsme v koncích. V rámci kvantové teorie pojmy trajektorie a pohyb po trajektorii nedávají smysl, proto je opustíme.

### 3.1.3 Popis pomocí pravděpodobnosti

V kvantové mechanice musíme používat popis pomocí pravděpodobnosti. V této části se studenti s tímto popisem blíže seznámí. Bude jim představen také popis pomocí hustoty pravděpodobnosti, se kterým se seznámí nejprve na klasických systémech: v jednorozměrném případě na příkladu závaží kmitajícího na pružině, v trojrozměrném případě na příkladu komára poletujícího po místnosti. Získanou představu pak využijí při práci s hustotou pravděpodobnosti nalezení elektronu v atomu vodíku. Tato část semináře slouží jako část přípravná, pokud se učitel domnívá, že jsou studenti s hustotou pravděpodobnosti již obeznámeni, může tuto část podle potřeby zkrátit nebo vynechat, případně přejít rovnou k trojrozměrnému případu.

#### 1D: Závaží na pružině

Nejprve se budeme zabývat hustotou pravděpodobnosti v jednorozměrném případě jednoduchého fyzikálního systému, kterým je závaží kmitající na pružině. Cílem této části je dovést studenty k porozumění pojmu hustota pravděpodobnosti nalezení závaží v určitém místě na ose  $x$ .

Následující postup budování představy hustoty pravděpodobnosti nalezení kmitajícího závaží je rozdělen do jednotlivých kroků – úkolů, které by měly studentům tuto představu usnadnit. V prvním kroku v úkolu 2 si studenti musí uvědomit, jak se kmitající závaží chová jako fyzikální systém, což využijí v úkolu 3, kde odhadují rozložení četnosti zachycení závaží v jednotlivých intervalech na

---

<sup>5</sup>Neurčitostí rozumíme směrodatnou odchylku, resp. odmocninu ze střední kvadratické odchylky.

ose  $x$ . V úkolu 4 se studenti setkají s pojmem relativní četnost, která při dostatečně velkém počtu měření limitně přechází v pravděpodobnost zachycení závaží v daném intervalu. V posledním úkolu 5 dochází ke vztažení pravděpodobnosti na délku intervalu, a k limitnímu přechodu k nekonečně malé délce intervalu, což vede k hustotě pravděpodobnosti.

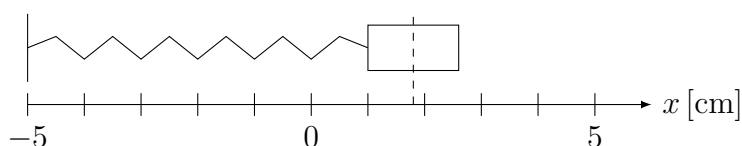
Pokud se učitel domnívá, že jsou studenti s pojmy četnost, relativní četnost a pravděpodobnost dobře obeznámeni a přechody mezi nimi jim nebudou dělat potíže, lze některé kroky vynechat či sloučit a věnovat se rovnou hustotě pravděpodobnosti.

## Krok 1 – Seznámení studentů s problematikou

Nejprve studentům představíme tento fyzikální systém a způsob, jakým jej budeme pozorovat. Závaží kmitá na pružině ve směru osy  $x$ , jak znázorňuje obrázek 3.2. Rovnovážná poloha závaží je v bodě  $x = 0$  a amplituda kmitů závaží je 5 cm. Osa  $x$  je rozdělena na intervaly o stejné délce, například  $\Delta x = 1$  cm. Závaží budeme pozorovat a v náhodných okamžicích<sup>6</sup> si zaznamenáme (např. do sloupcového grafu), ve kterém intervalu se závaží nacházelo, tj. budeme měřit jeho polohu. Za zachycení závaží v intervalu budeme považovat situaci, kdy se v daném intervalu nacházel jeho střed,<sup>7</sup> jehož poloha je na obrázku znázorněna přerušovanou čarou.

Pro ilustraci můžeme použít aplet *Klasický oscilátor*, kde je pro znázornění měření polohy závaží použito pořizování snímků závaží fotoaparát. V pracovním listu je také použita tato analogie, a proto pro měření polohy používáme výraz „focení“, který je studentům blízký z běžné mluvy.

Při zapnutí tlačítka *pomalé snímkování* je v apletu vidět princip sledování závaží, ale zároveň není prozrazen výsledek pozorování, jak ukazuje obrázek 3.3.



Obrázek 3.2: Závaží kmitající na pružince.

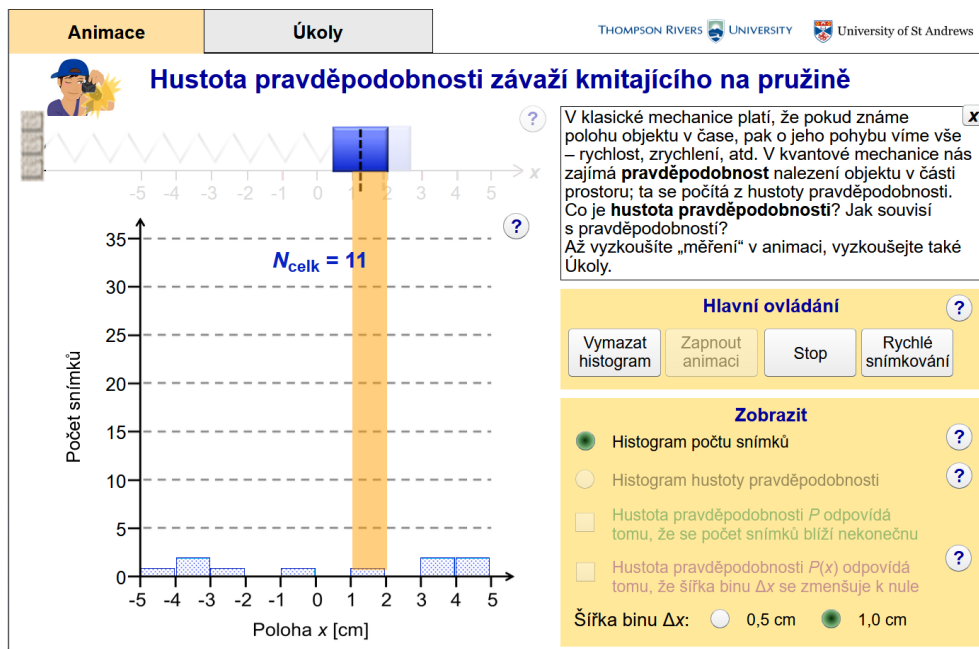
Pro bližší seznámení studentů s fyzikální podstatou problému slouží úkol 2, ve kterém studenti odhadují, ve kterých místech zachytíme závaží nejčastěji a ve kterých naopak nejméně často. Svůj odhad mohou zapsat nebo zakreslit do obrázku s pružinou v pracovním listu. Učitel může vyzvat několik studentů, aby svůj odhad řekli nahlas a zdůvodnili jej.

Závaží zachytíme nejčastěji v místech, ve kterých stráví nejvíce času, tj. pohybuje se v nich nejpomaleji. Naopak nejméně často zachytíme závaží v místech, kde se nezdrží dlouho, protože se tam pohybuje velkou rychlostí. Závaží má nejmenší

<sup>6</sup>Opravdu musí jít o náhodně vybrané okamžiky a ne o snímkování v pravidelných časových intervalech. Kdybychom si například zvolili jako snímkovací interval jednu desetinu periody závaží, zachytili bychom závaží na pěti místech cestou tam a na stejných místech cestou zpět. Naše měření by bylo ovlivněno vzorkovací frekvencí.

<sup>7</sup>Na volbě bodu, pomocí kterého určujeme interval, ve kterém se závaží nacházelo, nezáleží. Mohli bychom stejně dobře zvolit třeba levý okraj závaží nebo jiný libovolný bod závaží.

kinetickou energii, a tedy i nejmenší rychlost, v krajních polohách pružiny, naopak největší rychlost má při průchodu rovnovážnou polohou v bodě 0. Nejvícekrát tedy závaží zachytíme na krajích, čemuž odpovídají intervaly  $(-5, -4)$  a  $(4, 5)$ , nejméněkrát uprostřed v intervalech  $(-1, 0)$  a  $(0, 1)$ .



Obrázek 3.3: Rozhraní apletu Klasický oscilátor [18].

## Krok 2 – Četnost fotek v intervalu

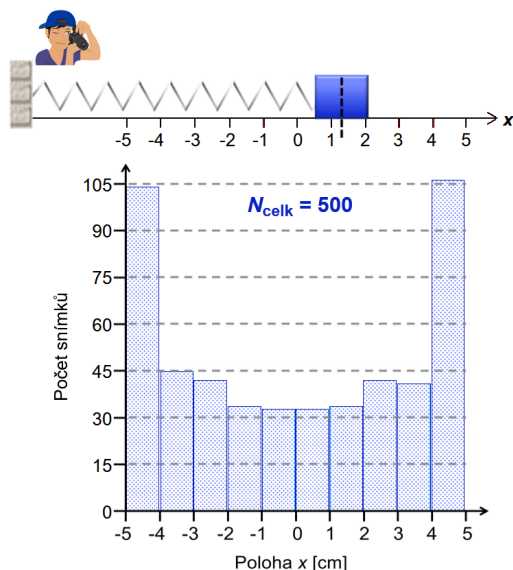
Na základě této zkušenosti studenti v úkolu 3 odhadují tvar sloupcového grafu, kde výška sloupce představuje počet snímků závaží v daném intervalu. Svůj kvalitativní závěr o četnosti vyfocení závaží z předchozího úkolu tak nyní reprezentují graficky. Pro zakreslení odhadu slouží graf a). Studenti do něj mohou zakreslit svůj odhad podoby sloupcového grafu.

V tomto místě je vhodné v apletu zapnout rychlé snímkování, které zvýší počet fotek závaží, a potvrdit, či vyvrátit tak studentské odhady. Graf rozložení četnosti fotek při pěti stech snímcích je znázorněn na obrázku 3.4. Sloupcový graf má výrazná maxima v krajních intervalech, zatímco v okolí rovnovážné polohy je výška sloupečků vyrovnaná.

## Krok 3 – Relativní četnost fotek v intervalu, pravděpodobnost

Následující část studenty přivede od četnosti fotek k relativní četnosti a limitním přechodem pak k pravděpodobnosti zachycení závaží v daném intervalu délky  $\Delta x$ .

V úkolu 4 si studenti nakreslí nebo představí, jak se sloupcový graf četnosti fotek změní, pokud každý sloupec vydělíme celkovým počtem fotek. Studenti by si měli uvědomit, že se tato změna v grafu projeví pouze změnou měřítka na svislé ose, ale jeho průběh se nezmění. Na svislé ose nyní bude místo četnosti relativní



Obrázek 3.4: Graf četnosti snímků závaží v jednotlivých intervalech pro počet měření  $N = 500$  z apletu [18].

četnost, tj.

$$\frac{\text{počet fotek v } \Delta x}{\text{celkový počet fotek}}$$

Studenty navedeme k tomu, že pokud bude počet fotek velký,  $N \rightarrow \infty$ , přechází relativní četnost v pravděpodobnost, tj.

$$\frac{\text{počet fotek v } \Delta x}{\text{celkový počet fotek}} \approx P(\text{vyfocení závaží v } \Delta x).$$

Na tomto místě lze studentům připomenout vztah mezi relativní četností a pravděpodobností, který mohou znát např. z příkladu s házením hrací kostkou.

Graf relativní četnosti snímků v apletu není zobrazen zvlášť, protože jde pouze o přeškálovaný graf absolutní četnosti. Pokud se učitel domnívá, že tento myšlenkový krok studenti zvládnou udělat i bez kreslení grafu, lze tento úkol přeskočit nebo jen stručně okomentovat a přejít přímo k hustotě pravděpodobnosti.

#### Krok 4 – Hustota pravděpodobnosti

V úkolu 5 přichází poslední myšlenkový krok k hustotě pravděpodobnosti, kdy pravděpodobnost zachycení závaží v daném intervalu vydělíme délkou tohoto intervalu a délku intervalu budeme poté limitně zmenšovat k nule.

Studenti opět odhadují, jak se předchozí graf změní, pokud výšku každého sloupečku vydělíme délkou intervalu a svůj odhad zakreslí do grafu c) v pracovním listu.

Vzhledem k tomu, že délka intervalu je  $\Delta x = 1$  cm, změní se opět pouze význam a jednotka veličiny na svislé ose. Půjde o hustotu pravděpodobnosti nalezení závaží v intervalu, tj.

$$\frac{P(\text{vyfocení závaží v } \Delta x)}{\Delta x} \approx \frac{(\text{počet fotek v } \Delta x)}{(\text{celkový počet fotek}) \cdot \Delta x}.$$



Zde můžeme v apletu přepnout zobrazení na graf hustoty pravděpodobnosti, který je znázorněn na obrázku 3.5 vlevo.

Pro ověření pochopení významu hustoty pravděpodobnosti můžeme položit studentům otázku, co dostaneme, pokud spočítáme plochu jednoho sloupečku nebo pokud sečteme plochu všech sloupečků.

V prvním případě dostaneme pravděpodobnost zachycení závaží v daném intervalu o délce 1 cm,

$$S_{\text{sloupečku}} = \text{základna} \cdot \text{výška} = 1 \text{ cm} \cdot \frac{P(1 \text{ cm})}{1 \text{ cm}} = P(1 \text{ cm}).$$

Ve druhém případě dostaneme pravděpodobnost zachycení závaží v kterémkoli intervalu, která je rovna jedné.

Ve druhé části úkolu 5 studenti odhadují, jak se graf hustoty pravděpodobnosti nalezení závaží v intervalu na ose  $x$  změní, pokud budeme postupně zmenšovat velikost intervalu  $\Delta x = 1 \text{ cm}, 1 \text{ mm}, 1 \mu\text{m}, \dots$ . Odhad studentů můžeme ověřit přepnutím šířky binu v apletu.

Graf se „zjemní,“ postranní maxima se stanou výraznějšími, prostřední část se „vyhladí.“ Při dalším limitním zmenšování intervalů přejde „měřená“ hustota pravděpodobnosti na teoretickou závislost danou vztahem<sup>8</sup>

$$\rho(x) = \frac{T^2}{4\pi^2 \sqrt{A^2 - x^2}},$$

kde  $T$  je perioda kmitání závaží a  $A$  amplituda. Tuto závislost lze také zobrazit v apletu [18], jak je znázorněno na obrázku 3.5 vpravo fialovou čarou.

Studenti nemívají problém spatřit tuto křivku ve sloupcovém grafu, ani odhadnout, kde má tato křivka maxima a minima, ale bývají překvapeni jejím tvarem, o kterém předpokládají, že bude spíše parabolický. Zejména neomezenost v krajních bodech (viz výše uvedený vztah) jen málokdo odhadne.

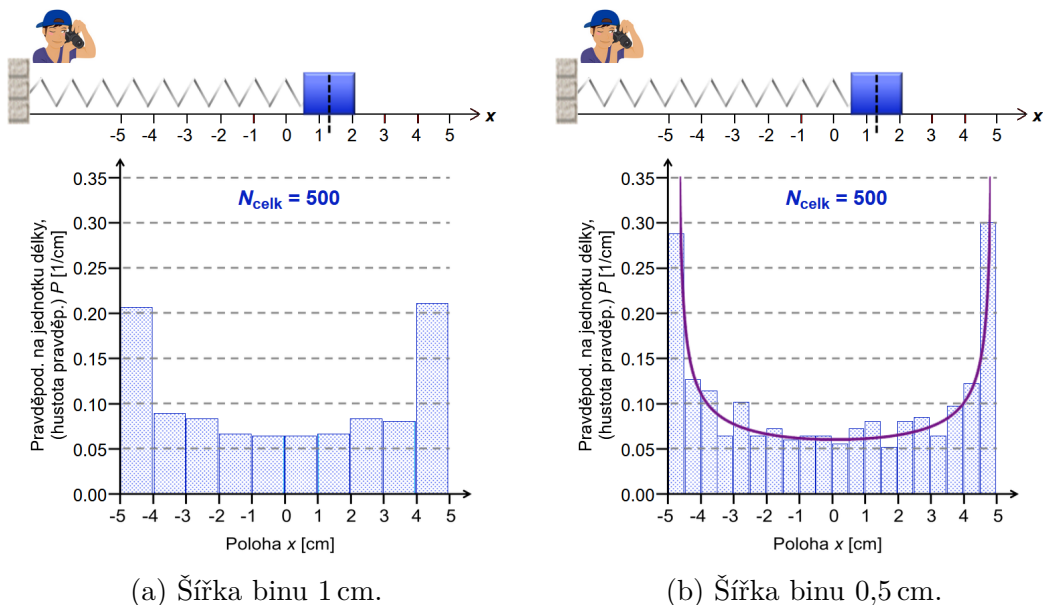
Studenti tak postupnou modifikací sloupcového grafu počtu snímků v jednotlivých intervalech došli až ke grafu hustoty pravděpodobnosti nalezení závaží na ose  $x$ , tedy v jedné dimenzi.

### 3D: Komár v místnosti vs. elektron v atomu vodíku

Nyní studenti aplikují své dosavadní poznatky o hustotě pravděpodobnosti na trojrozměrný systém, kterým je komár poletující po místnosti. V této části by studenti měli dojít k porozumění pojmu hustota pravděpodobnosti nalezení komára v určitém místě v prostoru.

Opět studentům představíme, nebo je vyzveme, aby sami navrhli způsob, jak budeme komára pozorovat. Podobně, jako byla v jednorozměrném případě osa  $x$  rozdělena na dílky o velikosti 1 cm, si nyní rozdělíme celý prostor na krychličky

<sup>8</sup>Odvození tohoto vztahu je v silách středoškoláků, ale z časových důvodů není vhodné odvození na tomto místě provádět se studenty.



Obrázek 3.5: Graf hustoty pravděpodobnosti nalezení závaží v intervalu o šířce 1 cm (vlevo) a 0,5 cm (vpravo) pro počet měření  $N = 500$  z apletu [18]. Graf vpravo je doplněn o teoretický průběh hustoty pravděpodobnosti (fialově).

o objemu  $1 \text{ cm}^3$ . Budeme komára sledovat a v různých okamžicích měřit a zaznamenávat jeho polohu,<sup>9</sup> jak ukazuje obrázek 3.6.

Počet fotek, na kterých komára zachytíme v dané části prostoru vymezené krychličkou, zaznamenáme např. intenzitou barvy krychličky. Zde konfrontujeme studenty s chybějícím rozměrem pro kreslení sloupcového grafu. Můžeme studenty vyzvat, aby navrhli nějaký způsob zaznamenání počtu fotek v každé krychličce, nebo sami navrhneme zaznamenávání pomocí barevné škály, kdy bílou barvou označujeme krychličky s velkým počtem fotek komára, odstíny červené s menším počtem a černou s nulovým počtem.

Dále studenty dovedeme k potřebě zobrazovat trojrozměrnou situaci v řezu. Můžeme použít zdůvodnění, že „intenzita barvy zadních krychliček nebude vidět přes přední krychličky,“ proto si pomůžeme tak, že vždy znázorníme „jen jednu vrstvu krychliček,“ tj. znázorníme situaci v řezu.

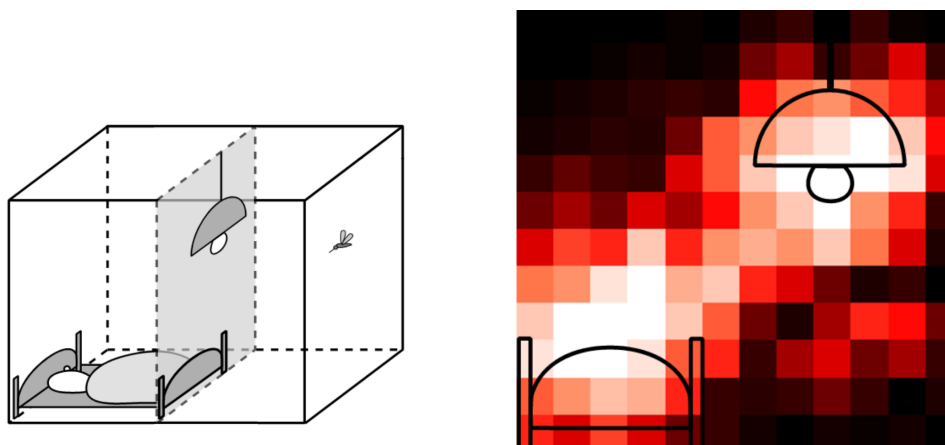
Naznačíme stejný myšlenkový postup, kterým studenti prošli v jednorozměrném případě: počet fotek v jedné krychličce vydělíme celkovým počtem fotek, pro velký počet snímků tak dostaneme pravděpodobnost vyfocení komára v této krychličce. Tuto pravděpodobnost vydělíme objemem krychličky a dostaneme tak hustotu pravděpodobnosti vyfocení komára uvnitř krychličky

$$\frac{P(\text{vyfocení komára v objemu } 1 \text{ cm}^3)}{1 \text{ cm}^3},$$

kterou znázorníme intenzitou barvy. Zmenšováním krychliček pak přejdeme k hustotě pravděpodobnosti nalezení komára v určitém místě v prostoru.

<sup>9</sup>V pracovním listu je pro měření polohy opět použit výraz „focení,“ ale musíme mít na paměti, že reálně z jednoho snímku polohu komára v trojrozměrném prostoru nelze určit. Byly by potřeba snímky téže situace ze dvou různých stran nebo jiný způsob měření polohy. Pro jednoduchost ale určení polohy komára nazýváme „vyfocení“.

Pro lepší pochopení znázornění hustoty pravděpodobnosti mohou studenti v úkolech 6 a 7 vzájemně prodiskutovat, ve kterých místech je podle obrázku 3.6 nejpravděpodobnější najít komára, podle čeho to lze poznat a jestli to odpovídá jejich zkušenostem. Mohou se také zkusit zamyslet, co lze usoudit z červené oblasti v pravé dolní části obrázku 3.6. Svě odpovědi mohou zaznamenat do pracovního listu nebo jen odpovědět slovně.



Obrázek 3.6: Snímek polohy komára v místnosti (vlevo) a rozložení hustoty pravděpodobnosti vyfocení komára v jednotkovém objemu v řezu šedou rovinou (vpravo). Bílá barva znázorňuje největší hustotu pravděpodobnosti, odstíny červené nižší a černá nulovou.

Podle obrázku 3.6 je v řezu šedou rovinou nejvyšší hustota pravděpodobnosti kolem lampy a v nohu postele, protože jsou tato místa označena bílou barvou. Právě v nich je tedy nejpravděpodobnější komára nalézt. O něco nižší hustota pravděpodobnosti v místech označených červenou barvou v pravé dolní části obrázku naznačuje, že by zde mohl být nějaký další pro komára přitažlivý objekt. Ponechme na fantazii studentů, zda se jedná o psí pelech či nevyneseny koš.

Pokud máme dostatek času, můžeme vnímavým studentům položit otázku, jestli je větší pravděpodobnost, že komára nalezneme v bílé krychličce těsně pod žárovkou lampy, nebo v červené oblasti cca  $5 \times 5$  krychliček v pravé dolní části obrázku.

Na tuto otázku nelze bez znalosti převodu barevné škály na číselné hodnoty hustoty pravděpodobnosti odpovědět. Jejím cílem je přivést studenty k tomu, že pravděpodobnost nalezení komára v dané oblasti ovlivňuje jak hustota pravděpodobnosti v různých místech dané oblasti, tak velikost oblasti. Touto otázkou si učitel připraví půdu pro rozdíl mezi radiální a bodovou hustotou pravděpodobnosti, která je popsána později.

### Rozdíl mezi komárem a elektronem

Poznatky získané o hustotě pravděpodobnosti při sledování komára studenti dále využijí při zkoumání hustoty pravděpodobnosti nalezení elektronu v atomu vodíku. Je důležité na tomto místě studenty znovu upozornit na několik zásadních rozdílů v měření polohy komára a elektronu, které plynou z odlišného chování objektů našeho klasického světa a objektů mikrosvěta, o nichž už studenti slyšeli na začátku semináře.

Komára můžeme fotit opakovaně (vyfocení jeho polohu nijak neovlivníme) a sledovat i trajektorii jeho pohybu. Proto nám ke zjištění hustoty pravděpodobnosti vyfocení komára stačí jeden komár. Teoreticky bychom mohli jednotlivé snímky opatřit časovými značkami, seřadit je za sebe a zpětně tak zrekonstruovat trajektorii pohybu komára po místnosti.

V případě elektronu musíme mít na paměti pravidla, kterými se řídí kvantový svět: to je pravidlo o superpozici, měření a relacích neurčitosti.

Změřením polohy elektronu ovlivníme jeho stav, proto už jej nemůžeme použít pro další měření. Chceme-li zjistit rozložení hustoty pravděpodobnosti „vyfocení“ elektronu, musíme si na každou fotku vzít „čerstvý“ elektron, který je ve stejném stavu jako ten původní. Obrázek hustoty pravděpodobnosti nalezení elektronu proto nemůžeme chápat jako „posloupnost poloh jednoho a téhož elektronu,“ ale právě jen jako hustotu pravděpodobnosti vyfocení elektronu v určitém místě získanou ze vzorku mnoha elektronů. Nemůžeme uvažovat o trajektorii elektronu nebo jeho pohybu uvnitř atomu.

Musíme si také uvědomit, že na obrázku znázorňujeme místa, kde bychom elektron vyfotili, kdybychom jej fotili, a nikoli místa, kde se elektron nachází sám o sobě, aniž bychom jeho polohu měřili. Otázka „Kde elektron je, když jej nefotíme?“ nemá v kvantové mechanice smysl, protože na ni v rámci této teorie neexistuje odpověď. Nadneseně lze říci, že „kvantová mechanika nepopisuje svět, jaký je, ale jaký ho pozorujeme.“

### 3.1.4 Orbitaly atomu vodíku

V následující sekci studenti využijí znalost hustoty pravděpodobnosti při zkoumání orbitalů atomu vodíku. Přesněji řečeno se budeme zabývat pouze stacionárními stavy atomu vodíku, to znamená stavy s ostrou hodnotou energie. Každý takový stav označíme trojicí kvantových čísel  $(n, l, m)$ , kde  $n$  je tzv. hlavní kvantové číslo,  $l$  je vedlejší kvantové číslo a  $m$  je magnetické kvantové číslo.

Orbital chápeme jako část prostoru, s velkou hustotou pravděpodobnosti nalezení elektronu, uvnitř kterého elektron nalezneme<sup>10</sup> s určitou pravděpodobností. Často se volí hranice pravděpodobnosti 95%. Můžeme ale orbital chápat také přímo jako průběh hustoty pravděpodobnosti.

#### Hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu v atomu vodíku

Připomeňme, že používáme model atomu, ve kterém jsou jádro i elektron opačně nabitě bodové částice. Elektron je v elektrostatickém poli jádra, které je sféricky symetrické, proto pro popis hustoty pravděpodobnosti použijeme sférické souřadnice. Průběh hustoty pravděpodobnosti má válcovou symetrii<sup>11</sup> při otáčení kolem osy  $z$ . Díky tomu můžeme hustotu pravděpodobnosti znázornit jen v řezu jednou rovinou a rotací kolem svislé osy (označme ji  $z$ ) dostaneme prostorovou představu.

<sup>10</sup>Záměrně používáme slovo „nalezneme“ místo „vyskytuje se,“ protože o výskytu elektronu, aniž bychom jej pozorovali, nemůžeme podle kvantové mechaniky říci nic.

<sup>11</sup>Je to důsledek toho, že vlnové funkce, z nichž určujeme hustotu pravděpodobnosti, jsou vlastními funkcemi operátorů  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$ .

Díky této symetrii si můžeme hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu rozdělit na dvě části. První část závisí na tom, jak daleko jsme od jádra, označujeme ji  $R$ . Druhá část závisí na směru (úhlu), kterým od jádra jdeme, označujeme<sup>12</sup> ji  $U$ .

Celkovou hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu na nějakém místě  $\rho$  tak můžeme zapsat jako

$$\rho = R \cdot U.$$

V následující části studenty seznámíme se zobrazováním jednotlivých částí hustoty pravděpodobnosti.

### Závislost hustoty pravděpodobnosti na směru (úhlu)

Část hustoty pravděpodobnosti závislou jen na tom, *kterým směrem od středu atomu jdeme*, znázorňujeme polárním nebo „paprskovým“<sup>13</sup> grafem.

V „paprskovém“ grafu je velikost hustoty pravděpodobnosti znázorněna pomocí intenzity barvy v daném směru. Úhel odečítáme od svislé osy  $z$  po směru hodinových ručiček, jak naznačují šipky v obrázku 3.7. Graf tak sestává z jakýchsi stejnobarevných „paprsků.“ Vidíme, že hodně jasná barva je ve směru  $0^\circ$ , hustota pravděpodobnosti je tedy v tomto směru velká. S rostoucím úhlem jas barvy postupně slábne a ve směru  $90^\circ$  je barva černá, což odpovídá nulové hustotě pravděpodobnosti.

V polárním grafu je velikost hustoty pravděpodobnosti v daném směru znázorněna vzdáleností bodu červené křivky od počátku, úhel odečítáme stejně jako v „paprskovém“ grafu. Vidíme, že ve směru  $0^\circ$  je bod křivky od počátku daleko, hustota pravděpodobnosti je tedy v tomto směru velká, zatímco ve směru např.  $45^\circ$  je bod křivky k počátku blíže a hustota pravděpodobnosti je v tomto směru menší. Ve směru  $90^\circ$  leží bod křivky přímo v počátku, hustota pravděpodobnosti v tomto směru je tedy nulová.

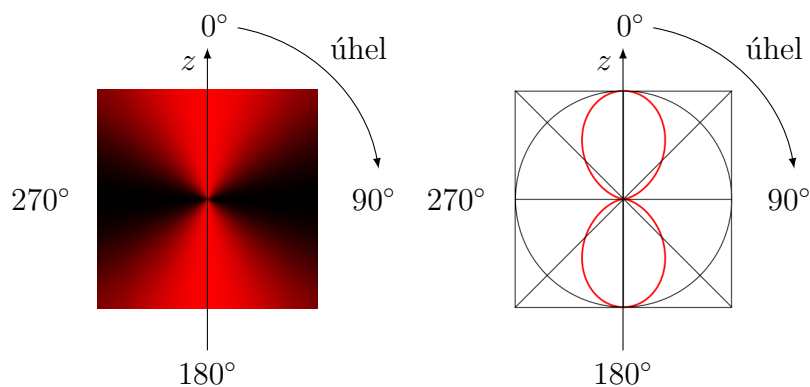
V úkolech 8 a 9 si mohou studenti ověřit, jestli porozuměli polárnímu a „paprskovému“ grafu.

V úkolu 8 mají studenti na základě obou grafů na obrázku 3.8 rozhodnout, ve kterém směru je hustota pravděpodobnosti největší, resp. nejmenší. Vidíme, že nejvzdálenější body polárního grafu a nejjasnější barva „paprskového“ grafu je ve směrech mířících do rohů čtverce, tedy ve směrech  $45^\circ$  a  $135^\circ$ . Naopak ve směrech  $0^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $180^\circ$  leží bod polárního grafu v počátku a barva „paprsků“ v tomto směru je černá, což odpovídá nulové hustotě pravděpodobnosti.

V úkolu 9 naopak studenti kreslí grafy pro případ, že je hustota pravděpodobnosti ve všech směrech stejná. Výsledkem je v polárním grafu množina bodů stejně vzdálených od počátku, tedy kružnice. V „paprskovém“ grafu bude barva všech „paprsků“ stejná, výsledkem tedy bude jednobarevný čtverec.

<sup>12</sup>V literatuře se jako  $R$  označuje tzv. radiální část vlnové funkce. Z ní počítaná část hustoty pravděpodobnosti závislá na vzdálenosti od jádra se označuje jako  $|R|^2$ . V tomto textu však s vlnovou funkcí nepracujeme, proto používáme toto zjednodušené značení radiální i úhlové části hustoty pravděpodobnosti.

<sup>13</sup>Nejde o oficiální pojmenování grafu, ale pouze o označení pro potřeby tohoto textu a pracovního listu.

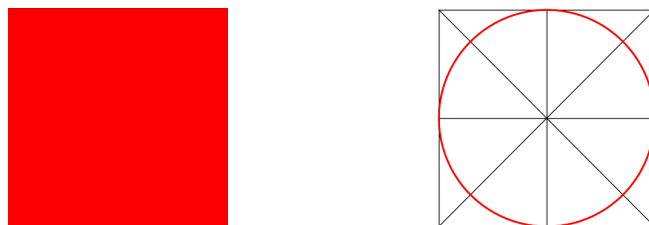


Obrázek 3.7: „Paprskový“ graf (vlevo) a polární graf (vpravo).

Pokud studentům dělá problém orientovat se v polárním grafu, je možné tento graf úplně vynechat a pracovat pouze s „paprskovým“ grafem.



Obrázek 3.8: „Paprskový“ a polární graf k úkolu 8.



Obrázek 3.9: Řešení úkolu 9 – „paprskový“ a polární graf.

### Závislost hustoty pravděpodobnosti na vzdálenosti od jádra

Část hustoty pravděpodobnosti závislou na *vzdálenosti od středu atomu* znázorníme kartézským grafem, kde na vodorovnou osu vynášíme vzdálenost od jádra, nejčastěji v jednotkách Bohrova poloměru  $a = 5 \cdot 10^{-11}$  m. Zde nám však jde jen o průběh dané funkce, proto v grafech měřítko neuvádíme.

V úkolu 10 studenti rozhodují, v jaké vzdálenosti od jádra je hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu největší, resp. nejmenší. V grafu na obrázku 3.10 vidíme, že pro stav atomu vodíku  $(1, 0, 0)$  je největší hustota pravděpodobnosti v počátku, s rostoucí vzdáleností rychle klesá jako  $R(r) \sim e^{-\frac{r}{a}}$ . Nulová je v nekonečnu.

## Radiální a bodová hustota pravděpodobnosti

Dovolují-li to časové možnosti, je vhodné na tomto místě udělat poznámku o rozdílu mezi radiální a bodovou hustotou pravděpodobnosti. Tuto poznámku si také často vynutí otázka studentů, jestli je tedy pravda, že je největší pravděpodobnost, že elektron nalezneme v jádře, jak by se mohlo zdát podle grafu 3.10. Tento rozdíl zde nyní okomentujeme podrobněji než je možno vyložit v semináři.

Tzv. *bodová hustota pravděpodobnosti*  $\rho$ , resp. její část závislá na vzdálenosti od počátku zde označovaná jako  $R$ , je hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu *na konkrétním místě v určité vzdálenosti* od středu atomu, jak znázorňuje obrázek 3.11 vlevo. Naproti tomu tzv. *radiální hustota pravděpodobnosti* je hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu *v určité vzdálenosti* od středu atomu, tj. na povrchu sféry se středem ve středu atomu, jak je znázorněno na obrázku 3.11 vpravo.

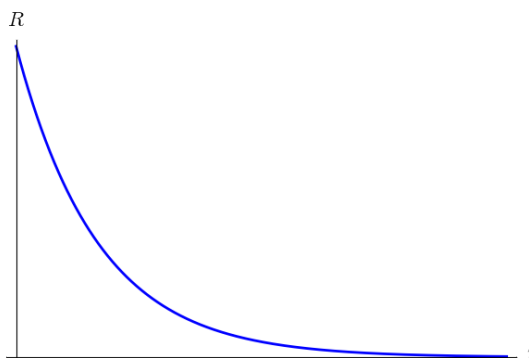
**Bodová hustota pravděpodobnosti:** Až dosud jsme pracovali pouze s bodovou hustotou pravděpodobnosti  $\rho$ , kterou jsme si rozdělili na součin úhlové části  $U$  a části závislé na vzdálenosti od středu atomu  $R$ . Tuto bodovou hustotu pravděpodobnosti bychom získali jako pravděpodobnost nalezení elektronu v určité malé oblasti (např. krychličky o objemu  $\Delta V = 1 \text{ cm}^3, 1 \text{ mm}^3, \dots$ ) dělenou objemem této oblasti

$$\rho = \frac{P(\Delta V)}{\Delta V}.$$

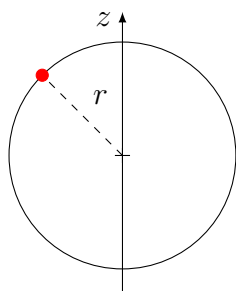
Pravděpodobnost nalezení elektronu v této malé oblasti vypočteme jako

$$P(\Delta V) = \rho \cdot \Delta V.$$

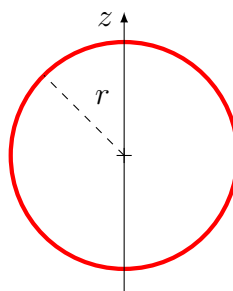
Pokud bychom chtěli určit pravděpodobnost, že elektron nalezneme v nějaké větší oblasti o objemu  $V$ , která je „vyplněna“ více malými krychličkami, v nichž je bodová hustota pravděpodobnosti různá, museli bychom vypočíst pravděpodobnosti nalezení elektronu v každé krychličce zvlášť a tyto pravděpodobnosti



Obrázek 3.10: Graf závislosti části hustoty pravděpodobnosti  $R$  na vzdálenosti od jádra  $r$  pro stav atomu vodíku označovaný jako  $1s$  nebo  $(1, 0, 0)$ .



(a) Konkrétní bod na sféře.



(b) Body o určité vzdálenosti od středu atomu.

Obrázek 3.11: Znázornění oblasti, kterou uvažujeme při počítání bodové hustoty pravděpodobnosti (vlevo), resp. radiální hustoty pravděpodobnosti (vpravo).

pak sečíst.<sup>14</sup> V případě, že je bodová hustota pravděpodobnosti ve všech místech stejná, stačí tuto bodovou hustotu vynásobit objemem oblasti

$$P(V) = \rho \cdot V.$$

Všimněme si, že tato bodová hustota pravděpodobnosti má fyzikální jednotku  $\frac{1}{\text{cm}^3}$ . Když ji tedy vynásobíme objemem s jednotkou  $\text{cm}^3$ , dostaneme bezrozměrnou pravděpodobnost.

**Radiální hustota pravděpodobnosti:** Pokud bychom chtěli určit pravděpodobnost, že elektron nalezneme na povrchu sféry poloměru  $r$ , mohli bychom si tuto oblast rozdělit místo krychliček na „tenké plátky“ obsahu  $\Delta S$  a tloušťce  $\Delta r$ , která bude pro všechny plátky stejná. Pokud je  $P(V)$  pravděpodobnost, že elektron nalezneme v celé vrstvě tloušťky  $\Delta r$ , pak můžeme radiální hustotu pravděpodobnosti zavést jako

$$\rho_{\text{rad.}}(r) = \frac{P(V)}{\Delta r},$$

což odpovídá tomu, že elektron nalezneme ve vzdálenosti  $r$  od jádra. V případě, že je bodová hustota pravděpodobnosti  $\rho$  ve všech místech stejná, vypočteme pravděpodobnost nalezení elektronu v této vrstvě tak, že tuto bodovou hustotu pravděpodobnosti vynásobíme povrchem koule  $S = 4\pi r^2$ ,

$$P(V) = p(r) \Delta r = \rho \cdot \Delta S \Delta r = \rho \cdot 4\pi r^2 \Delta r.$$

Všimněme si, že bodová hustota pravděpodobnosti  $\rho$  má fyzikální jednotku  $\frac{1}{\text{cm}^3}$  a povrch koule má jednotku  $\text{cm}^2$ . Fyzikální jednotka radiální hustoty pravděpodobnosti  $\rho_{\text{rad.}}(r)$  tak je  $\frac{1}{\text{cm}}$ .

V případě základního stavu atomu vodíku, kdy je úhlová část hustoty pravděpodobnosti ve všech směrech stejná (jako tomu bylo v úkolu 9), má bodová hustota pravděpodobnosti průběh jako  $\rho \sim e^{-\frac{r}{a}}$ . Povrch koule o poloměru  $r$  roste

<sup>14</sup>Přesněji řečeno zintegrovat bodovou hustotu pravděpodobnosti přes objem dané oblasti.



s rostoucím poloměrem jako  $S \sim r^2$ . Tyto dva faktory dohromady určují výsledný průběh radiální hustoty pravděpodobnosti  $\rho_{\text{rad}} \sim r^2 e^{-\frac{r}{a}}$ .

Pravděpodobnost nalezení elektronu na povrchu koule s velmi malým poloměrem je velmi malá kvůli faktoru  $r^2$ , který je pro  $r \approx 0$  téměř nulový. Ve velmi malých vzdálenostech od jádra<sup>15</sup> tak elektron nalezneme jen s malou pravděpodobností. Pravděpodobnost nalezení elektronu na povrchu koule s velkým poloměrem je také velmi malá kvůli rychle klesající exponenciále  $e^{-\frac{r}{a}}$ , která pro  $r \rightarrow \infty$  klesá k nule a převládá nad výrazem  $r^2$ . Pravděpodobnost nalezení elektronu ve velkých vzdálenostech od jádra je také velmi malá. Elektron tedy s největší pravděpodobností můžeme najít v intervalu vzdáleností mezi těmito krajními polohami. V programu *Orbitaly* [25] lze radiální část hustoty pravděpodobnosti zobrazit ve čtvrtém grafu.

Na tomto místě můžeme studentům připomenout otázku z příkladu s komárem v místnosti, jestli je větší pravděpodobnost nalezení komára v malé oblasti pod žárovkou s vysokou hustotou pravděpodobnosti, nebo ve velké oblasti v pravé dolní části obrázku 3.6 s nižší hustotou pravděpodobnosti. V případě elektronu v atomu vodíku je naší malou oblastí s vysokou bodovou hustotou pravděpodobnosti oblast jádra, zatímco sféra s větším poloměrem odpovídá velké oblasti.

Studenti by si na tomto příkladu měli uvědomit, že pravděpodobnost nalezení elektronu v určité oblasti nezávisí pouze na velikosti bodové hustoty pravděpodobnosti v této oblasti, ale také na tom, jak je daná oblast „velká“.

## Celková hustota pravděpodobnosti

Studenti se seznámili se znázorněním obou částí hustoty pravděpodobnosti pomocí grafů. Nyní tyto znalosti využijí při řešení úkolů 11–13, ve kterých se budou zabývat tvarem orbitalů atomu vodíku.

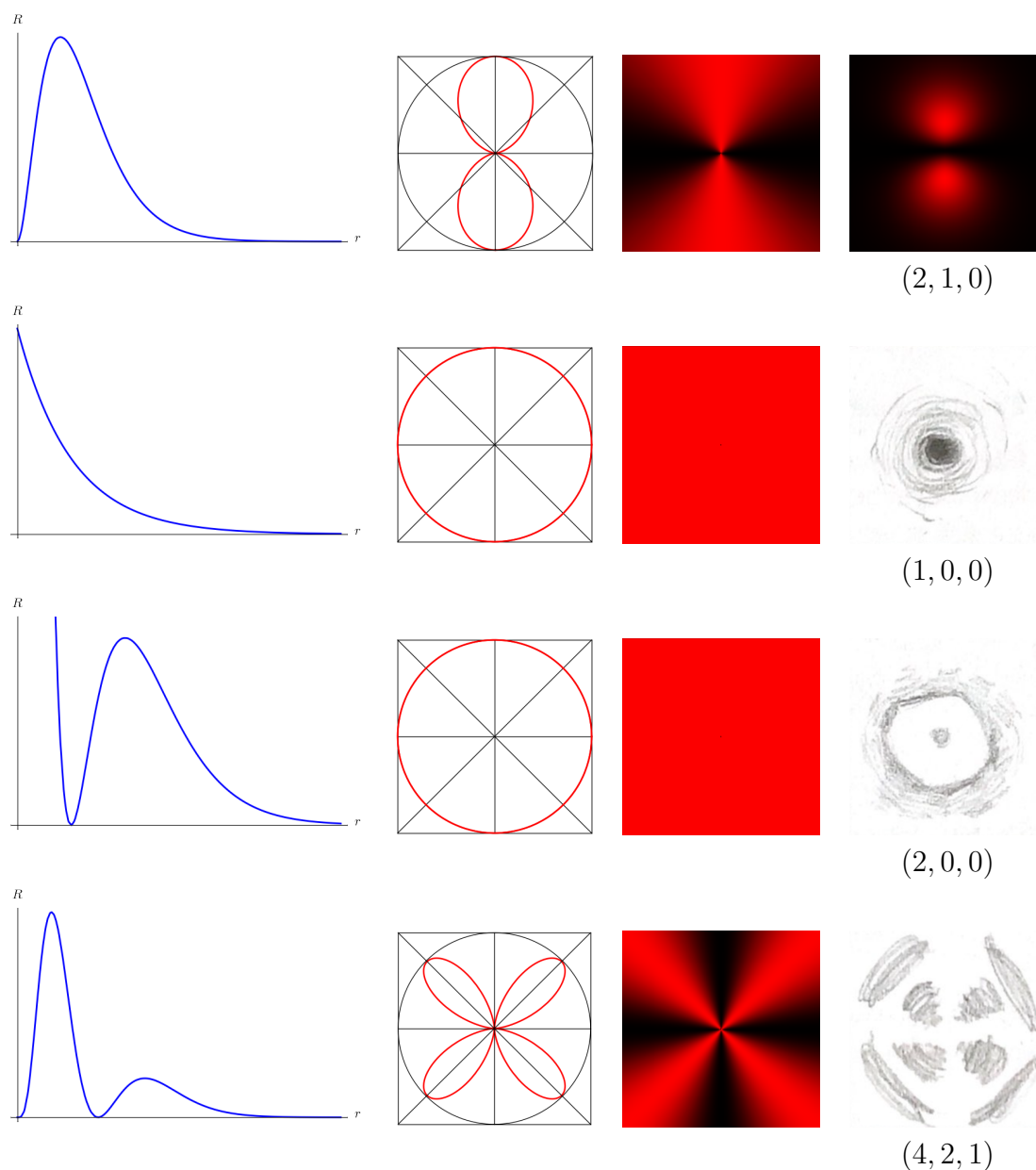
V úkolu 11 nejprve studenti pomocí grafů obou částí hustoty pravděpodobnosti znázorní celkovou hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu v atomu vodíku pro několik stavů. Stavů jsou označeny trojicí kvantových čísel  $(n, l, m)$  v závorce, každému stavu odpovídá jeden řádek tabulky 3.2.

V prvním sloupci tabulky je graf části hustoty pravděpodobnosti závislé na vzdálenosti od jádra, v prostředních dvou sloupcích je polární a „paprskový“ graf úhlové části hustoty pravděpodobnosti. Graf celkové hustoty pravděpodobnosti studenti kreslí do připravených rámečků v pravém sloupci tabulky. Využijí při tom znázornění pomocí intenzity barvy<sup>16</sup> jako v případě komára v místnosti. Je vhodné, pokud studenti mají tužky či pastelky, se kterými lze snadno stínovat.

První řádek tabulky pro stav  $(2, 1, 0)$  slouží jako vzor, ostatní řádky studenti vyplňují samostatně. Podle časových možností a schopností studentů můžeme předvést nebo nechat studenty vysvětlit způsob sestavení celkové hustoty pravděpodobnosti v prvním řádku, případně je může nechat pracovat rovnou samostatně

<sup>15</sup>Nebo dokonce přímo v oblasti zaujímané jádrem – tato pravděpodobnost je asi  $10^{-14}$ , viz úlohu č. 4339 Sbírkou řešených úloh [2]

<sup>16</sup>Měřítka barevné škály ani kartézských grafů není na všech obrázcích stejné, lze tedy navzájem porovnávat pouze jejich tvar. Bílá místa na některých obrázcích vznikla nastavením barevné škály tak, aby byla dobře viditelná i místa s nízkou hustotou pravděpodobnosti. V bílých oblastech je hustota pravděpodobnosti větší než je nastavená mezní hodnota.



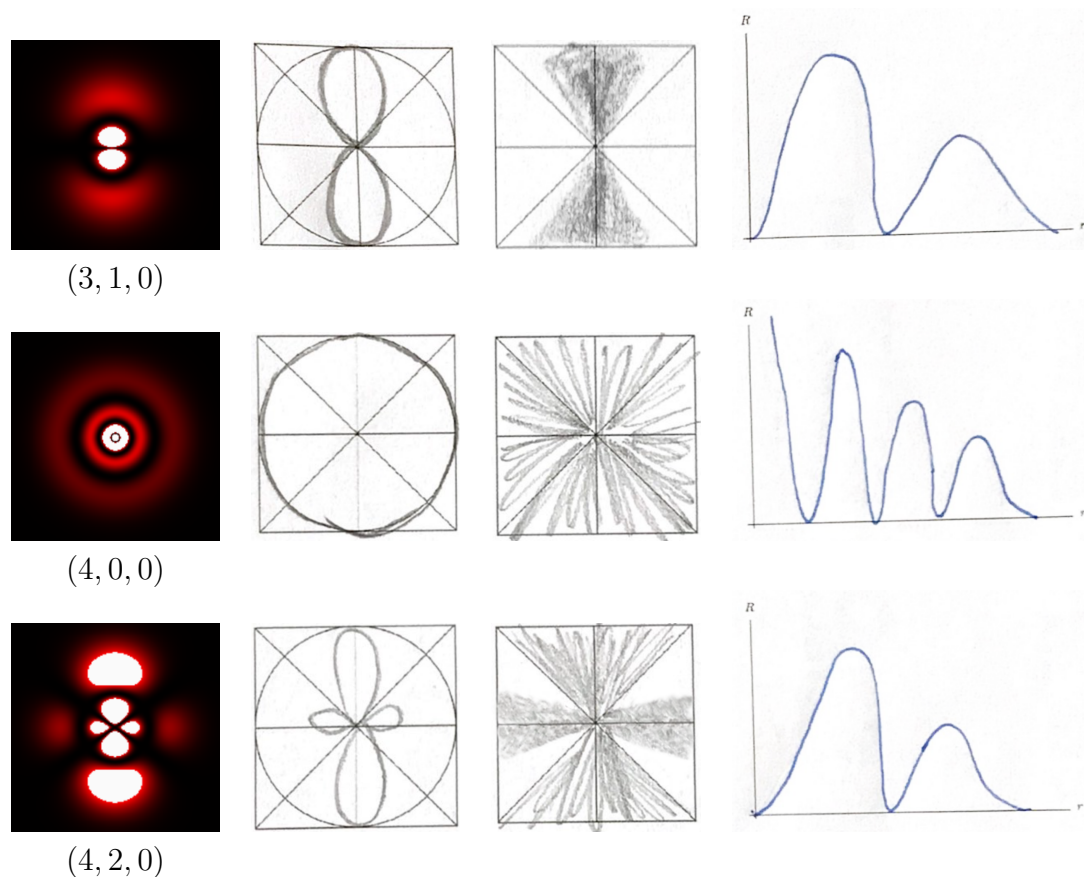
Tabulka 3.2: Ukázka studentského řešení úkolu 11.

či ve skupinkách.

Pro zobrazení správných řešení můžeme použít program *Orbitaly* [25], ve kterém se po nastavení příslušných kvantových čísel  $(n, l, m)$  zobrazí grafy jednotlivých částí hustoty pravděpodobnosti a také graf celkové hustoty pravděpodobnosti. Z tohoto programu pocházejí obrázky „paprskových“ grafů a obrázky znázorňující celkové hustoty pravděpodobnosti. Můžeme nechat studenty, aby úkoly řešili sami svým tempem a správná řešení si zobrazili na počítači, nebo můžeme správná řešení ukázat na projektoru hromadně. Studenti také mohou správná řešení vyčíst z tabulky A.1 přiložené k pracovnímu listu. V této tabulce jsou znázorněny grafy celkové hustoty pravděpodobnosti pro stavy s hlavním kvantovým číslem  $n = 1, 2, 3, 4$ . V řádcích jsou stavy se stejným hlavním kvantovým číslem  $n$ , sloupce odpovídají stavům se stejným vedlejším kvantovým číslem  $l$ . Každý sloupec je ještě dále rozdělen na podsloupce s různým magnetickým kvantovým

číslem  $m$ .

Úkoly 12 a 13 jsou opačného charakteru než úkol 11, studenti musí analyzovat graf celkové hustoty pravděpodobnosti a do připravených rámečků nakreslit průběh její úhlové části a části závislé na vzdálenosti od jádra. Úhlovou část mohou zakreslovat pomocí polárního nebo „paprskového“ grafu. Úkol 12 by měli stihnout všichni studenti, rychlejší z nich mohou pokračovat volitelným úkolem 13.



Tabulka 3.3: Ukázka studentského řešení úkolů 12, 13.

### 3.1.5 Prostorová představa orbitalů

Poslední část semináře je věnovaná prostorové představě tvaru orbitalů atomu vodíku. Studenti si díky válcové symetrii hustoty pravděpodobnosti mohou představit průběh hustoty pravděpodobnosti v prostoru tak, že budou rovinný řez, se kterým pracovali doposud, otáčet kolem osy  $z$ . Mohou zkusit vlastními slovy popsat tvary, které tak získají. Pro studenty bývá překvapivé, že nejde vždy o souvislé oblasti, jako např. u stavů s  $l = 0$ , kdy jde o kulové vrstvy oddělené sférou s nulovou hustotou pravděpodobnosti. Tato část bývá pro některé studenty velmi zajímavá, pro jiné dost náročná. Lze ji vynechat či zadat pouze zájemcům.

#### Poznámka o fyzikální a chemické bázi

Někteří studenti mohou namítnout, že v se chemii setkali s jinými tvary orbitalů než na tomto semináři. Je potřeba si uvědomit, že v chemii se obvykle

používá odlišná skupina stavů. V chemii bývá často vyobrazována a jako orbital nazývána pouze část hustoty pravděpodobnosti závislá na úhlu, protože je podstatná pro popis chemické vazby a vysvětlení její prostorové orientace. Musíme dát pozor, aby nedošlo k záměně s celkovou hustotou pravděpodobnosti.

I přesto se v učebnicích chemie můžeme setkat s jiným tvarem úhlové části hustoty pravděpodobnosti, než s jakým jsme pracovali. Je to dáno tím, že v chemii se pro popis chemické vazby lépe hodí funkce, které mají „stejný tvar“ a různou prostorovou orientaci, zatímco ve fyzice se lépe pracuje s funkcemi, pro něž je význačná svíslá osa  $z$ . Podobně, jako si můžeme pro řešení nějakého problému zvolit určitou soustavu souřadnic a v případě potřeby přejít do jiné, lze podobnou matematickou transformaci<sup>17</sup> udělat i pro přechod od jednoho systému funkcí ke druhému a přejít tak od „fyzikálních funkcí“ k „chemickým funkcím“.

Poznamenejme ještě, že v chemii bývá zvykem orbitaly místo kvantových čísel označovat písmeny podle vedlejšího kvantového čísla  $l$ . Orbitaly s kvantovým číslem  $l = 0, 1, 2, 3, 4$  se tak po řadě nazývají orbitaly s, p, d, f, g.

### 3.1.6 Závěr semináře

Poslední úkol je reflektivní, studenti znovu napíší vlastními slovy, co podle nich je orbital, jestli se nějak změnila jejich představa o orbitalech, co si ponechali z původní představy, co nového do ní přidali. Může opět vyzvat studenty, aby některé své postřehy sdíleli s ostatními.

Spolu se studenty tak uděláme závěr, že orbital chápeme jako část prostoru, ve které můžeme elektron v atomu nalézt s velkou pravděpodobností. Měli bychom studentům znovu připomenout, že jsme se zabývali pouze orbitaly atomu vodíku, protože pro atomy s více elektrony je situace složitější.

### 3.1.7 Kvantová čísla

V této části krátce okomentujeme význam kvantových čísel, již nad časové možnosti tohoto semináře. Také zde uvedeme několik otázek a doplňujících úkolů týkajících se tabulky A.1, které můžeme zvědavým studentům předložit např. k domácímu zamýšlení či další práci, ale už nejsou součástí pracovního listu.

**Kvantová čísla** jsou čísla, kterými označujeme jednotlivé stavy elektronu v atomu vodíku: každému stavu jednoznačně přiřazujeme trojici kvantových čísel  $(n, l, m)$ , která nazýváme

$n$	hlavní kvantové číslo ,
$l$	vedlejší kvantové číslo ,
$m$	magnetické kvantové číslo .

<sup>17</sup>Díky tomu, že stacionární stavy atomu vodíku, které se liší pouze kvantovými čísly  $l$  a  $m$  (tj. mají stejné hlavní kvantové číslo  $n$ ), mají stejnou energii. Je jejich lineární kombinace také stacionárním stavem, tj. také se jedná o stav s ostrou hodnotou energie. Můžeme tak přejít k jiné bázi stacionárních funkcí.

Tato kvantová čísla se objevují při řešení rovnice<sup>18</sup> pro atom vodíku, ze které je možno získat matematický zápis funkcí, které popisují tvar orbitalů, jimiž jsme se v tomto pracovním listě zabývali. Z této rovnice také dostaneme několik podmínek, které musí kvantová čísla  $n$ ,  $l$ ,  $m$  splňovat. Ne každá trojice libovolně zvolených čísel totiž popisuje možný stav atomu vodíku.

## Úlohy propojující kvantová čísla a tvar orbitalů

Nyní se budeme zabývat tím, jak spolu souvisí kvantová čísla a tvar orbitalu. V tabulce A.1 v příloze jsou vykresleny tvary orbitalů atomu vodíku pro prvních několik stavů atomu vodíku popsanych hlavním kvantovým číslem  $n = 1, 2, 3, 4$  a také příslušné grafy úhlové části hustoty pravděpodobnosti a části hustoty pravděpodobnosti závislé na vzdálenosti od jádra. K této tabulce se vztahují následující úkoly.

1\*) Některé kombinace čísel  $n, l, m$  neodpovídají existujícím stavům atomu vodíku (proto jsou v tabulce A.1 příslušná políčka prázdná). Hlavní kvantové číslo  $n$  může mít hodnoty libovolného přirozeného čísla  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Na základě pozorování z tabulky napište podmínky, které musí kvantová čísla  $n, l, m$  splňovat, aby označovala existující stav atomu vodíku.

**Řešení:** V tabulce A.1 si můžeme všimnout, že vedlejší kvantové číslo  $l$  má hodnoty rovné přirozeným číslům nebo nule. Z tabulky vidíme, že políčka, kde je vedlejší kvantové číslo  $l$  větší nebo rovno hlavnímu kvantovému číslu  $n$ , jsou prázdná a neodpovídají tedy možnému stavu atomu vodíku. Z toho lze usoudit, že vedlejší kvantové číslo musí splňovat podmínku

$$0 \leq l < n.$$

V záhlaví tabulky si můžeme všimnout, že magnetické kvantové číslo  $m$  má celočíselné hodnoty, které ale v absolutní hodnotě nejsou větší než vedlejší kvantové číslo  $l$ , tedy

$$|m| \leq l.$$

2\*) Zaměřte se na první sloupec tabulky A.1, kde jsou zobrazeny stavy s  $l = 0$ . Najdete nějaký vztah mezi obrázky orbitalů a hlavním kvantovým číslem  $n$ ? Souvisí nějak průběh části hustoty pravděpodobnosti  $R$  s hlavním kvantovým číslem  $n$ ?

**Řešení:** Pro první sloupec tabulky s  $l = 0$  platí, že hlavní kvantové číslo  $n$  odpovídá počtu „vrstev“ orbitalu, tj. oblastí s nenulovou hustotou pravděpodobnosti, které jsou navzájem odděleny sférou s nulovou hustotou pravděpodobnosti. Pro  $n = 1$  je to jedna „vrstva“, pro  $n = 2$  dvě „vrstvy“, atd. Tento počet „vrstev“ odpovídá počtu lokálních maxim částí hustoty pravděpodobnosti  $R$  (počítáno včetně maxima v počátku pro  $r = 0$ ).

3\*) Platí váš závěr i pro ostatní sloupce? Jak ho musíte případně pozměnit?

<sup>18</sup>Jedná se o tzv. stacionární Schrödingerovu rovnici pro atom vodíku.

**Řešení:** Pro sloupce s  $l \neq 0$  neplatí, že by hlavní kvantové číslo  $n$  udávalo počet maxim částí hustoty pravděpodobnosti  $R$ . Pro  $n = 2$ ,  $l = 1$  má funkce  $R$  jedno maximum, pro  $n = 3$ ,  $l = 1$  má dvě maxima, pro  $n = 2$ ,  $l = 2$  opět jedno maximum. Můžeme si všimnout, že počet maxim funkce  $R$  závisí na obou kvantových číslech  $n$ ,  $l$  a můžeme jej zapsat jako  $n - l$ . Tento vztah je obecnější, platí také pro stavy z prvního sloupce, pro které jsme v předchozím úkolu vlastně použili jeho speciální případ  $l = 0$ . Můžeme tak říct, že

$$(\text{počet maxim částí hustoty pravděpodobnosti } R) = n - l.$$

4\*) Podívejte se na stavy, které se liší pouze hlavním kvantovým číslem  $n$ , ale mají stejnou dvojici kvantových čísel  $(l, m)$  jako např. stavy  $(2,1,0)$  a  $(3,1,0)$ . Kde je v tabulce najdete? Mají tyto stavy navzájem něco společného? Co pozorujete o tvaru orbitalů?

**Řešení:** Stavy lišící se pouze hlavním kvantovým číslem  $n$  jsou v tabulce v jednom sloupci označeném kvantovým číslem  $l$  a zároveň v jednom podsloupci označeném kvantovým číslem  $m$ . V tabulce se tak nacházejí přímo pod sebou. Vidíme, že tyto orbitály mají stejný úhlový tvar a liší se pouze počtem „vrstev“. Jejich úhlová část hustoty pravděpodobnosti je pro tyto stavy stejná.

## 3.2 Pilotáž semináře

Seminář popsaný výše jsem zrealizovala během února a března 2022 se třemi skupinami středoškolských studentů. Po skončení semináře jsem od studentů získala zpětnou vazbu v podobě dotazníku, který je v příloze C této práce. Od jejich vyučujícího, případně od studentů samotných, jsem ústně zjistila, do jaké míry se s orbitály setkali v dřívější výuce. Získala jsem expertní posouzení od učitele z praxe. Na základě všech těchto zkušeností jsem náplň semináře upravila do stávající podoby.

### 3.2.1 Realizace semináře

Poprvé jsem seminář realizovala se skupinou pěti studentů maturitního semináře z fyziky z Gymnázia Budějovická 8. února. Jednalo se o studenty se zájmem o fyziku mikrosvětla. Na základě této zkušenosti jsem upravila jeho náplň i časové rozložení tak, aby bylo možné jej realizovat v čase 90 minut, což se při dalších dvou testovacích bězích semináře podařilo dodržet včetně získávání zpětné vazby od studentů.

Druhé testování probíhalo dne 21. února na Wichterlovu gymnázium v Ostravě se skupinou sedmnácti studentů maturitního semináře z chemie, z nichž většina navštěvuje také maturitní seminář z fyziky, a jednoho zájemce z kvinty. Třetí běh semináře jsem realizovala 1. března na Gymnázium Přírodní škola v rámci mimoškolního setkání Klubu vědců, který si studenti sami organizují a zabývají se na něm různými tématy z přírodních věd. Na tomto semináři bylo celkem patnáct studentů ze septimy a kvinty a také několik zájemců z tercie.

Všichni studenti, kromě studentů tercie z Klubu vědců, se již setkali s pojmem orbital v chemii v souvislosti s elektronovým obalem atomu a elektronové konfiguraci atomu a v souvislosti s chemickou vazbou  $\sigma$  a  $\pi$ , a to převážně v prvním ročníku střední školy, tj. v kvintě. Pro některé studenty tak šlo o čerstvé učivo, jiní se s ním setkali již před delší dobou.

Studenti se do semináře vesměs aktivně zapojovali, řešili úkoly, odhadovali výsledky a sdíleli své odhady s ostatními, spolupracovali a dovysvětlovali si věci navzájem. Úroveň semináře považují za přiměřeně zvolenou, protože studenti byli schopni sledovat výklad, odpovídat na otázky, řešit úkoly a také jejich dotazy směřovaly k podstatě věci. Část studentů byla schopna dojít ke správnému řešení úkolů samostatně na poprvé, někteří potřebovali nejprve projít s mou pomocí či nápovědou několik úkolů, než byli schopni je řešit samostatně. Mezi studenty nebyl nikdo, kdo by nedokázal samostatně vyřešit alespoň část hlavního úkolu 11. Tím jsem ověřila, že je seminář vhodně navržen z časového hlediska i úrovně obtížnosti.

### 3.2.2 Zpětná vazba

#### Zpětná vazba od studentů

Ve zpětné vazbě jsem od studentů zjišťovala, v čem pro ně byl seminář přínosný a zajímavý a co pro ně bylo nejhůře srozumitelné. Dále jsem zjišťovala, jestli studentům příklad s pružinou pomohl v pochopení konceptu hustoty pravděpodobnosti a které grafy znázornění hustoty pravděpodobnosti pro ně byly lépe pochopitelné (viz dotazník v příloze C).

Jako přínos studenti zmiňovali nové poznatky o orbitalech a pohled na ně, lepší představu o tvarech orbitalů, propojení fyziky a právě probíraného učiva v chemii, zdokonalení se v práci s grafy, seznámení se s novými typy grafů, někteří zmínili koncept hustoty pravděpodobnosti.

Překvapivé a zajímavé pro studenty bylo odlišné chování kvantových objektů, popis orbitalů pomocí grafů, spojování grafů do jednoho, co znamená a jak se počítá hustota pravděpodobnosti a také tvar orbitalů atomu vodíku. Několik studentů uvedlo, že je překvapilo, že orbitály mohou mít „nulové body,“ tedy oblasti s nulovou hustotou pravděpodobnosti.

Jako nejhůře srozumitelnou část většina studentů zmiňovala začátek semináře a příklad s pružinou do chvíle, než jej pochopili. Tři čtvrtiny studentů pak uvedly, že jim příklad s pružinou pomohl v dalším porozumění hustotě pravděpodobnosti. Další obtížně pochopitelnou částí bylo pro některé studenty odlišné chování elektronů a práce s polárními grafy.

Zjistila jsem, že mezi grafem úhlové části hustoty pravděpodobnosti a části závislé na vzdálenosti od počátku nebyl výrazný rozdíl co se týče srozumitelnosti, asi polovině z nich připadala snadnější na představu úhlová část hustoty pravděpodobnosti, druhé polovině část závislá na vzdálenosti. Naproti tomu „paprskový“ graf byl pro studenty v porovnání s polárním grafem výrazně srozumitelnější (polární graf upřednostnilo jen pět studentů z celkového počtu třiceti sedmi studentů).

Studenti většinou kladně hodnotili průvodní text v pracovním listu, v němž mohli dohledat informace a pokyny, které nezachytili z výkladu. Pouze několik studentů uvedlo, že by jim stačilo méně textu. Také s ohledem na tiskovou ná-

ročnost je v této práci pracovní list k dispozici ve dvou verzích: pracovní list obsahující studijní text a také zkrácená verze pracovního listu bez textu, pouze se zadáním úkolů.

Celková odezva studentů na seminář byla velmi dobrá, ať už ji podali písemně či jen ústně. Celkově hodnotili seminář jako přínosný, zábavný a zajímavý.

### **Zpětná vazba od učitelů**

Od učitelů jsem zpětnou vazbu získala pouze ústně, šlo o učitele matematiky–chemie a učitele fyziky–biologie s dlouholetou praxí na gymnáziu. Jako přínos semináře zmiňovali hlavně práci s různými grafy a jejich propojování, seznámení studentů s polárním grafem, se kterým se v jiných oblastech učiva na střední škole pravděpodobně nesetkají a také propojení matematiky, fyziky a chemie. Jeden z učitelů navrhl, že by zkrátil či vynechal přípravnou část hustoty pravděpodobnosti v jednorozměrném případě, protože si umí představit, že by studenti zvládli rovnou trojrozměrný případ.

### **Expertní posouzení pracovního listu**

O expertní posouzení pracovního listu jsem ve spolupráci s vedoucí práce požádala sedm učitelů z praxe formou emailu, pouze od dvou učitelů se však toto posouzení podařilo skutečně získat.

V textu emailu byly učitelům položeny otázky, jestli jim pracovní list připadá srozumitelný a dobře strukturovaný, jestli zvolená úroveň odpovídá dle jejich zkušeností schopnostem žáků, pro které je určen, a zda si dovedou představit, že by pracovní list využili ve své výuce.

Dle soudu dvou učitelů matematiky–fyziky se šestiletou praxí na gymnáziu je struktura náplně semináře logická a nápaditá, úroveň pracovního listu je zvolena náležitě, pracovní list je srozumitelný většinou bezproblémově. Některé problematické formulace byly označeny a podrobněji okomentovány v příloženém dokumentu, na jejichž základě jsem tyto části doplnila a upravila.

Jeden z dotazovaných učitelů by pracovní list ve své výuce rád využil a připadal mu inspirativní. Zejména ocenil nápaditost a přirozenost zavedení veličiny hustota pravděpodobnosti. Druhý učitel by si využití pracovního listu uměl představit v maturitním ročníku semináře z fyziky. Ocenil názornost zavedení hustoty pravděpodobnosti a upozorňoval, že jde o pro studenty objektivně těžké učivo.

### **Závěr z pilotáže**

Na základě zpětné vazby od studentů i učitelů, expertního posouzení i vlastní zkušenosti považuji navržený seminář za smysluplný a reálně využitelný na střední škole v semináři fyziky či chemie.



## 4. Úlohy do Sbírky řešených úloh

Jako doplnění vysokoškolského studijního textu popsaného v kapitole 2 této práce vzniklo také pět úloh zaměřených na problematiku atomu vodíku a vodíku podobného atomu. Úlohy jsou online dostupné ve Sbírce řešených úloh [2], některé z úloh byly přímo zařazeny do zmíněného studijního textu.

Každou z úloh a hlavní myšlenku jejího řešení nyní stručně okomentujeme. Za názvem úlohy je v závorce uvedeno její číslo a úroveň náročnosti (VŠ vysokoškolská úloha, SŠ+ obtížnější středoškolská či velmi jednoduchá vysokoškolská úloha, SŠ středoškolská úloha). V hranaté závorce je uveden zdroj, odkud bylo převzato zadání úlohy. Úlohy, u kterých zdroj není uveden, jsou z interních úloh vedoucí práce.

### Systém energetických hladin atomu vodíku (4335, SŠ)

V této úloze je úkolem načrtnout na svislou energetickou osu energetické hladiny atomu vodíku a zodpovědět, jak je možné, že je energie záporná.

Úloha nejprve stručně komentuje vztah pro energii elektronu v atomu vodíku a souvislost s hlavním kvantovým číslem a navazuje tak na úlohu (629) *Energetické hladiny atomu vodíku*. Dále na základě analogie s elektrostatickým polem v klasické fyzice vede k zamyšlení nad významem potenciální energie ve vztahu k energii vázaných stavů elektronu v atomu.

V řešení jsou v tabulce napočítány hodnoty prvních šesti nejmenších povolených energií atomu vodíku. Hlavní částí úlohy je grafické řešení, kde jsou energetické hladiny vyneseny na svislé energetické ose.

Tato úloha je zároveň součástí vysokoškolského studijního textu popsaného v kapitole 2 této práce.

### Stupeň degenerace energetických hladin atomu vodíku (4337, SŠ)

Úkolem v této úloze je určit stupeň degenerace  $n$ -té energetické hladiny atomu vodíku vůči kvantovým číslům  $l$  a  $m$  nejprve bez uvažování spinu elektronu, pak také se spinem elektronu.

V úloze je nejprve vysvětlen pojem degenerace energetické hladiny. Úloha vede k uvědomění si vztahů mezi kvantovými čísly popisujícími stavu atomu vodíku. Pro vyřešení první části úlohy je potřeba zjistit, kolik existuje možných dvojic kvantových čísel  $n$  a  $l$  pro pevně zvolené hlavní kvantové číslo  $n$ . Při tomto výpočtu je potřeba určit součet aritmetické řady.

Druhá část úlohy využívá výsledku získaného v první části, kdy se uvažováním spinu elektronu stupeň degenerace oproti případu bez uvažování spinu zdvojnásobí.

Úloha je také součástí vysokoškolského studijního textu popsaného v kapitole 2 této práce.

### Pravděpodobnost nalezení elektronu v jádře (4339, VŠ) [7]

Cílem této úlohy je určit pravděpodobnost, že elektron v základním stavu vodíku nalezneme v oblasti zaujímané jádrem, tedy uvnitř koule o poloměru,

který odpovídá rozměrům jádra,  $d = 10^{-15}$  m.

Tato úloha navazuje na velmi podobné úlohy (618) *Elektron mezi kulovými plochami*, (619) *Elektron vně koule* a (2018) *Pravděpodobnost nalezení elektronu za Bohrovým poloměrem*.

Základní myšlenkou řešení je integrace hustoty pravděpodobnosti (tj. druhé mocniny absolutní hodnoty vlnové funkce) elektronu v základním stavu přes objem zaujímaný jádrem. Integrace je provedena ve sférických souřadnicích a pro výpočet integrálu přes radiální souřadnici je potřeba využít dvakrát metodu per partes. Dosazení číselných hodnot je v tomto případě za hranicemi numerických schopností běžné kalkulačky či tabulkového procesoru, proto je pro výpočet přibližného výsledku použit Taylorův rozvoj.

Úloha odpovídá na otázku, která se často objevovala při pilotáži pracovního listu *O orbitalech atomu vodíku* popsaneho v kapitole 3 této práce.

### „Balmerova“ série pro ion helia $\text{He}^+$ (4340, SŠ)

V této úloze je cílem porovnat „Balmerovu“ sérii ionu helia  $\text{He}^+$  s Balmerovou sérií vodíku. Úloha pracuje s vodíku podobným atomem.

V úloze je nejprve stručně vysvětlen vztah pro energii stavů vodíku podobného atomu a souvislost rozdílů energetických hladin a spektra atomu.

Při řešení je potřeba porovnat energie fotonů vyzářených při přechodech z vyšších energetických hladin na hladinu prvního excitovaného stavu pro ion helia a odpovídající přechody v atomu vodíku a určit energii základního stavu atomu vodíku a ionu helia. Úlohu lze řešit kvantitativně a obě energie dopočítat, nebo si lze uvědomit, že energie všech stavů ionu helia je díky vyššímu protonovému číslu větší než odpovídající hladiny pro atom vodíku, proto jsou větší také energetické rozdíly mezi každými dvěma hladinami.

### Spektrum pozitronia (4353, SŠ+) [7]

Úloha věnovaná pozitroniu, které je příkladem dalšího vodíku podobného atomu, má čtyři na sebe navazující podúkolky. Nejprve je potřeba rozhodnout, zda je pro určení energetických hladin atomu vodíku, resp. pozitronia potřeba uvažovat redukovanou hmotnost. Dále je úkolem určit energii základního stavu pozitronia, určit vlnovou délku fotonu vyzářeného při přechodu pozitronia z prvního excitovaného stavu do základního stavu a porovnat ji s odpovídajícím přechodem v atomu vodíku v Lymanově sérii.

Na začátku úlohy je stručně okomentována redukovaná hmotnost a její souvislost s energiemi stavů atomu, vztah pro redukovanou hmotnost zde však není odvozen. Prvního podúkol vede k uvědomění si, že v atomech s jádrem mnohem hmotnějším než je hmotnost elektronu, je rozdíl mezi redukovanou hmotností a hmotností elektronu pro počítání energetických hladin zanedbatelný, zatímco pro atomy s lehkým jádrem, jehož hmotnost je srovnatelná s hmotností elektronu, je potřeba při výpočtu energií použít redukovanou hmotnost.

Třetí a čtvrtý podúkol pak navazují na předchozí úlohu, nyní se už explicitně počítá rozdíl energetických hladin a odpovídající vlnová délka pro vodík i pozitronium.

Úloha je rovněž součástí studijního textu z kapitoly 2 této práce.

# Závěr

V rámci této diplomové práce jsem se věnovala atomu vodíku na vysokoškolské a středoškolské úrovni a našla jsem vhodné materiály, které se týkají výuky atomu vodíku. Jejich přehled je v kapitole 1.

Na základě těchto materiálů jsem vytvořila vysokoškolský studijní text k předmětu *Kvantová mechanika* věnovaný atomu vodíku a poskytla jej studentům učitelství jako podpůrný materiál k tomuto předmětu.

Navrhla jsem také seminář a pracovní list s názvem *O orbitalech atomu vodíku* určený studentům střední školy. Tento seminář se věnuje popisu orbitalů atomu vodíku a propojuje učivo spadající do chemie a do fyziky. Seminář jsem realizovala na třech vybraných středních školách se skupinami středoškolských studentů. Na základě zpětné vazby od studentů a učitelů, svých zkušeností s výukou semináře a na základě expertního posouzení návrhu semináře dvěma zkušenými učiteli z praxe jsem seminář a vzniklý pracovní list upravila. Nyní je pracovní list spolu s průvodním textem k dispozici učitelům, kteří by jej chtěli zařadit do své výuky.

Dále bylo v rámci této práce zpracováno pět úloh jako doplnění středoškolského a vysokoškolského studijního textu. Tyto úlohy jsou zveřejněny online ve *Sbírce řešených úloh* [2].

Dalším rozšířením této diplomové práce by mohlo být nalezení či vytvoření vhodných experimentálních úloh (např. pro Interaktivní fyzikální laboratoř na KDF), ve kterých by se studenti seznámili se spektrem atomu vodíku ať už kvalitativně či kvantitativně.

Na základě kladných reakcí studentů na vyučovaný seminář vidím potenciál v sestavení podobných dílčích seminářů věnovaných dalším tématům kvantové mechaniky.



# Seznam použité literatury

- [1] KOUPILOVÁ, Z. a KÁCOVSKÝ, P. *Kvantová fyzika (nejen) pro budoucí učitele*. 2022. Rukopis.
- [2] *Sbírka řešených úloh*. Navštíveno: 2022. Dostupné na: <https://reseneulohy.cz/cs/fyzika>.
- [3] SKÁLA, L. *Úvod do kvantové mechaniky*. 2. vydání. Praha: Univerzita Karlova, Nakladatelství Karolinum, 2011. ISBN 978-80-246-2022-0.
- [4] PIŠÚT, J., GOMOLČÁK, L. a ČERNÝ, V. *Úvod do kvantovej mechaniky*. Bratislava: Knižničné a edičné centrum FMFI UK, 2008. ISBN 978-80-89186-33-4.
- [5] BÍLEK, O. a KAPSA, V. *Kvantová mechanika pro učitele*. 2003. Rukopis.
- [6] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1995. ISBN 0-13-191175-9.
- [7] FRENCH, A. P. a TAYLOR, E. F. *Introduction to Quantum Physics: MIT Introduction to Quantum Physics*. Boca Raton: W. W. Norton & Company, 1978. ISBN 0-7487-4078-3.
- [8] MCINTYRE, D. H. *Quantum Mechanics: a paradigms approach*. San Francisco: Jim Smith, Pearson Education, 2012. ISBN 0-321-76579-6.
- [9] FEYNMAN, R. P., LEIGHTON, R. B. a SANDS, M. *Feynmanovy přednášky z fyziky s řešenými příklady 3/3*. 1. vydání. Praha: Fragment, 2002. ISBN 80-7200-421-2.
- [10] ŠTOLL, I. *Fyzika pro gymnázia: Fyzika mikrosvěta*. 4. vydání. Praha: Prometheus, 2002. ISBN 978-80-7196-386-8.
- [11] LEPIL, O., BEDNAŘÍK, M. a HÝBLOVÁ, R. *Fyzika pro střední školy II*. 4. přepracované vydání. Praha: Prometheus, 2012. ISBN 978-80-7196-429-2.
- [12] HALLIDAY, D., RESNICK, R. a WALKER, J. *Fyzika*. 4. přepracované vydání. Brno: Vutium, 2013. ISBN 978-80-214-4123-1.
- [13] MÜLLER, R. a WIESNER, H. Teaching Quantum Mechanics on an Introductory Level. *American Journal of Physics*. 2002, roč. 70. S. 200–209.
- [14] SCHNEIDER, M. B. Quantum Mechanics for Beginning Physics Students. *The Physics Teacher*. 2010, roč. 48. S. 484–486.
- [15] HOBSON, A. Teaching Quantum Physics Without Paradoxes. *The Physics Teacher*. 2007, roč. 45. S. 96–99.
- [16] KOHNLE, A., CASSETTARI, D., EDWARDS, T. et al. A new multimedia resource for teaching quantum mechanics concepts. *American Journal of Physics*. 2012, roč. 80. S. 148–153.

- [17] ZOLLMAN, D. A. a REBELLO, N. S. Conceptual Understanding Of Quantum Mechanics After Using Hands-On And Visualization Instructional Materials. *Papers presented at the annual meeting National Association for Research in Science Teaching*. 1999.
- [18] KOHNLE, A., CASSETTARI, D., EDWARDS, T. et al. *Klasický oscilátor*. Navštíveno: 2022. Dostupné na: <http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/ClassicalOscillator/ClassicalOscillator.html>.
- [19] BUDDE, M., NIEDDERER, H., SCOTT, P. et al. 'Electronium': a quantum atomic teaching model. *Physics Education*. 2002, roč. 37. S. 197.
- [20] BUDDE, M., NIEDDERER, H., SCOTT, P. et al. The quantum atomic model 'Electronium': A successful teaching tool. *Physics Education*. 2002, roč. 37. S. 204.
- [21] STRNAD, J. a WARREN, J. 'Electronium'? No, thanks – Answer to the criticisms of J. Strnad and J. Warren. *Physics Education*. 2002, roč. 38. S. 268.
- [22] KIRAY, S. A. The Pre-service Science Teachers' Mental Models for Concept of Atoms and Learning Difficulties. *International Journal of Education in Mathematics, Science and Technology*. 2016, roč. 4, č. 2. S. 147.
- [23] WIENER, J. Science Teachers' Conceptions of Atomic Models. *European Journal of Mathematics and Science Education*. 2020, roč. 1, č. 2. S. 67–80.
- [24] ZYLA, P. A., BARNETT, R. M., BERINGER, J. et al. Review of Particle Physics. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*. 2020, roč. 2020, č. 8.
- [25] BROKLOVÁ, Z. a KOUPIL, J. *3D\_Orbitaly*. Navštíveno: 2022. Dostupné na: <http://kdf.mff.cuni.cz/~koupilova/orbitals/?lang=CZ>.

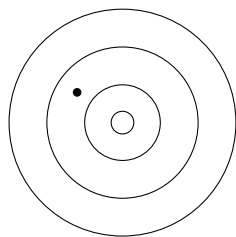
# A. O orbitalech atomu vodíku

1) V chemii jste se setkali s pojmem *orbital*. Napište nejprve vlastními slovy, co podle vás orbital je.

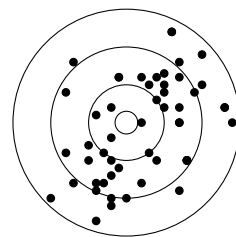
## Jak popsat pohyb částice aneb kde je elektron?

V klasické mechanice popisujeme pohyb těles pomocí jejich souřadnic a rychlosti, pro každé těleso tak můžeme nakreslit trajektorii jeho pohybu. Na základě znalosti počáteční polohy a rychlosti kuličky můžeme jednoznačně předpovědět, jak se bude pohybovat a kam dopadne, pokud ji vystřelíme do terče, jak je vidět na obrázku vlevo.

Vpravo je vidět terč po vystřelení sta elektronů „připravených stejným způsobem.“ Přestože byly počáteční podmínky elektronů stejné, dostali jsme po každé jiný výsledek, v terči jsou stopy po elektronech na různých místech. Nemůžeme tedy předpovědět, kam přesně daný elektron dopadne, ale pouze určit pravděpodobnost, s jakou dopadne do daného místa. V kvantové mechanice proto používáme popis pomocí pravděpodobnosti.



terč po vystřelení sta klasických kuliček se stejnými počátečními podmínkami

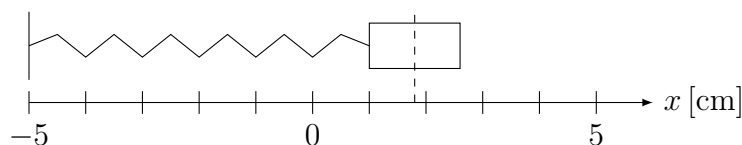


terč po vystřelení sta „stejně připravených“ elektronů

## Popis pomocí pravděpodobnosti

### 1D: Závaží na pružince

Představme si závaží na pružině, které kmitá ve směru osy  $x$ . Osu  $x$  si rozdělíme na intervaly o stejné délce, například 1 cm. Závaží budeme fotit<sup>1</sup> a zaznamenávat si (např. do sloupcového grafu), kolikrát jsme závaží vyfotili ve kterém intervalu.<sup>2</sup>



<sup>1</sup>Focení zde představuje měření polohy.

<sup>2</sup>Za vyfocení závaží v intervalu budeme považovat situaci, kdy se v daném intervalu nacházel jeho střed.

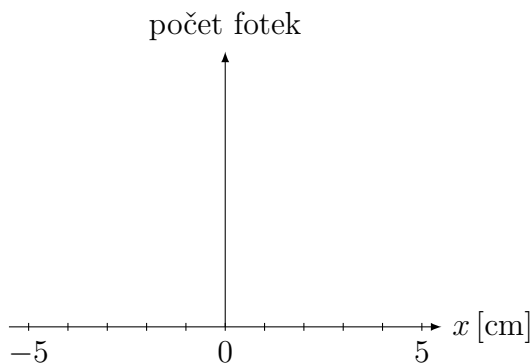
2) Odhadněte, ve kterých místech zachytíme závaží nejčastěji a ve kterých naopak nejméně často. Svůj odhad запиšte nebo zakreslete do obrázku s pružinou.

3) Odhadněte, jak bude vypadat sloupcový graf, kde výška sloupce představuje počet fotek závaží v daném intervalu. (Zakreslete do grafu a.)

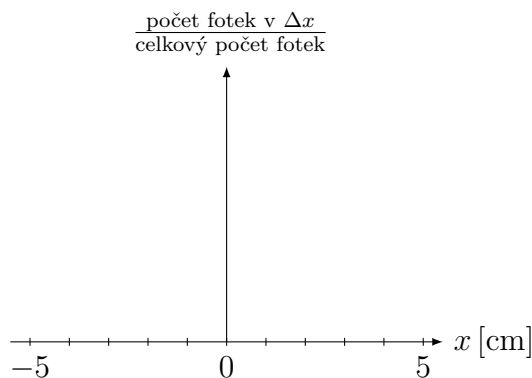
4) Odhadněte, jak se předchozí graf změní, pokud výšku každého sloupce vydělíme celkovým počtem fotek. (Zakreslete do grafu b.) Pokud je počet fotek hodně velký (např. 1000 a více), dostaneme tak přímo pravděpodobnost vyfocení závaží v daném intervalu,

$$\frac{\text{počet fotek v } \Delta x}{\text{celkový počet fotek}} \approx P(\text{vyfocení závaží v } \Delta x).$$

a)



b)

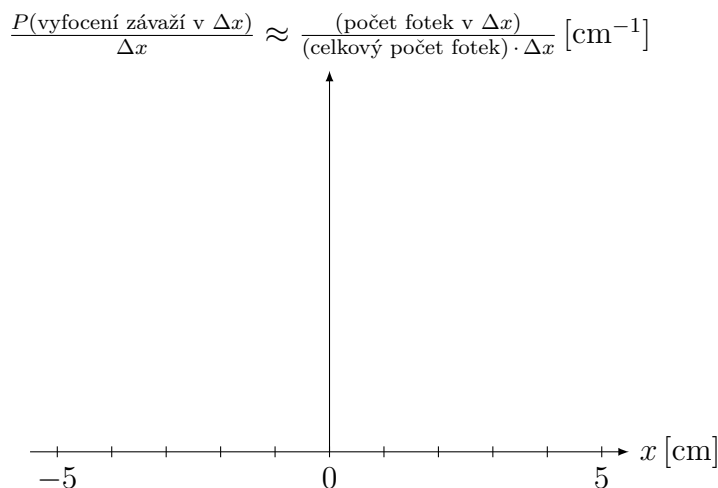


5) Nyní navíc pravděpodobnost vyfocení závaží v daném intervalu vydělíme délkou intervalu. Na svislé ose tak bude

$$\frac{P(\text{vyfocení závaží v } \Delta x)}{\Delta x} \approx \frac{(\text{počet fotek v } \Delta x)}{(\text{celkový počet fotek}) \cdot \Delta x}.$$

Odhadněte, jak se tento graf bude měnit, pokud budeme postupně zmenšovat velikost intervalu  $\Delta x = 1 \text{ cm}, 1 \text{ mm}, 1 \mu\text{m}, \dots$ ? (Zakreslete do grafu c.)

c)





### 3D: Komár v místnosti vs. elektron v atomu vodíku

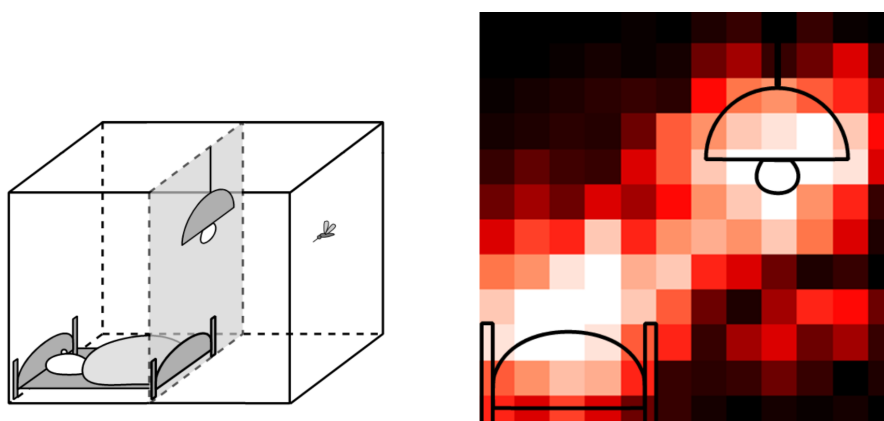
Podívejme se nyní na trojrozměrný případ – budeme se zabývat výskytem komára poletujícího po místnosti a následně budeme zkoumat elektron v atomu.

Podobně, jako jsme si v jednorozměrném případě rozdělili osu  $x$  na dílky o velikosti třeba 1 cm, si nyní rozdělíme celý prostor na kostičky o objemu  $1 \text{ cm}^3$ . Budeme „fotit“<sup>3</sup>komára a počet fotek, na kterých komára zachytíme v dané části prostoru vymezené krychličkou, zaznamenáme např. intenzitou barvy krychličky.<sup>4</sup> Protože ale „intenzita barvy zadních krychliček nebude vidět přes přední krychličky,“ pomůžeme si tak, že vždy znázorníme „jen jednu vrstvu krychliček,“ tj. znázorníme situaci v řezu, jak ukazuje obrázek A.1 vpravo.

Intenzita barvy má význam pravděpodobnosti vyfocení komára v objemu krychličky, tj.

$$\frac{P(\text{vyfocení komára v objemu } 1 \text{ cm}^3)}{1 \text{ cm}^3}.$$

Tato veličina má podobný charakter jako hustota, protože je to pravděpodobnost dělená objemem, bývá zvykem ji nazývat *hustota pravděpodobnosti*.



Obrázek A.1: Snímek polohy komára v místnosti (vlevo) a rozložení hustoty pravděpodobnosti vyfocení komára v jednotkovém objemu v řezu šedou rovinou (vpravo). Bílá barva znázorňuje největší hustotu pravděpodobnosti, odstíny červené nižší a černá nulovou.

6) Ve kterých místech je podle obrázku A.1 nejpravděpodobnější najít komára? Jak to poznáme?

7\*) Navrhněte, co můžeme usoudit z červené oblasti v pravé dolní části obrázku 1.

<sup>3</sup>Z jednoho snímku polohu komára nelze určit, byly by potřeba snímky téže situace ze tří různých stran. Pro jednoduchost ale určení polohy komára nazýváme „vyfocením“.

<sup>4</sup>Vyhnmeme se tím problému chybějícího rozměru pro kreslení sloupcového grafu.

**!POZOR!** Ve „focení“ komára a elektronu je několik zásadních rozdílů, které plynou z odlišného chování objektů našeho klasického světa a objektů mikrosvěta:

**Komár:** Komára můžeme fotit opakovaně a sledovat trajektorii jeho pohybu (vyfocení jeho polohu nijak neovlivníme). Proto nám ke zjištění hustoty pravděpodobnosti vyfocení komára stačí jeden komár.

**Elektron:** „Vyfocení“ ovlivníme stav elektronu, proto už jej nemůžeme použít pro další focení. Abychom zjistili hustotu pravděpodobnosti vyfocení elektronu, musíme si na každou fotku vzít „čerstvý“ elektron, který je ve stejném stavu jako ten původní. Na obrázku proto není zachycena trajektorie jednoho a téhož elektronu, ale právě jen hustota pravděpodobnosti vyfocení elektronu v určitém místě získaná ze vzorku mnoha elektronů.

Na obrázku znázorňujeme místa, kde bychom elektron vyfotili, kdybychom jej fotili. Otázka „Kde by elektron byl, kdybychom jej nevyfotili?“ nemá v kvantové mechanice smysl.

## Orbitaly atomu vodíku

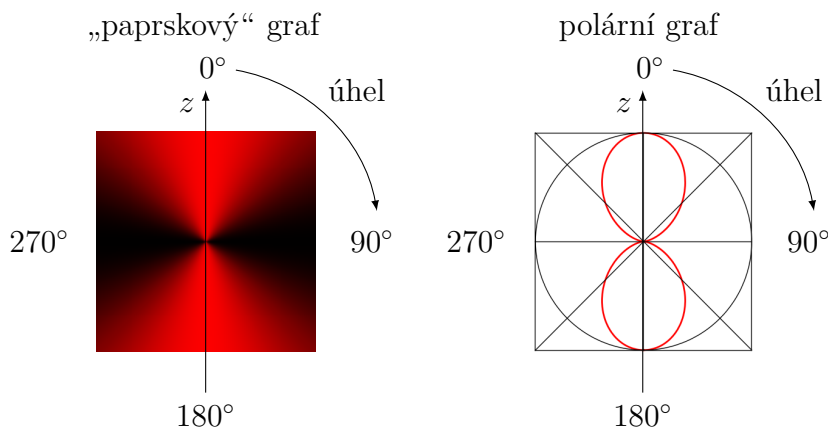
Nyní se pojďme podívat, jak je to s hustotou pravděpodobnosti vyfocení elektronu v nejjednodušším atomu v přírodě – atomu vodíku. Atomu vodíku má sféricky symetrické elektrostatické pole, hustota pravděpodobnosti má díky tomu válcovou symetrii. Můžeme proto znázornit hustotu pravděpodobnosti jen v jedné rovině a rotací kolem svislé osy (označujeme ji  $z$ ) dostaneme prostorovou představu. Díky této symetrii si můžeme hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu rozdělit na dvě části. První část závisí na tom, jak daleko jsme od jádra, označujeme ji  $R$ . Druhá část závisí na směru (úhlu), kterým od jádra jdeme, označujeme ji  $U$ . Celkovou hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu na nějakém místě tak můžeme zapsat jako

$$\rho = R \cdot U .$$

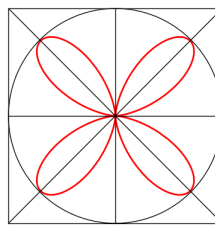
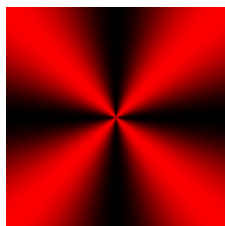
Pojďme nyní prozkoumat každou část zvlášť.

### Závislost hustoty pravděpodobnosti na směru (úhlu)

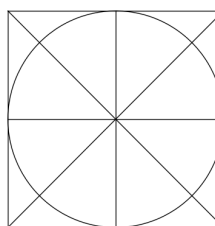
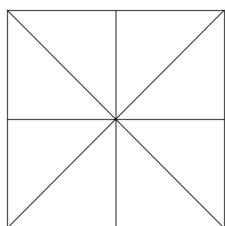
Část hustoty pravděpodobnosti podle toho, *kterým směrem od středu atomu jdeme*, znázorňujeme polárním nebo „paprskovým“ grafem.



8) Ve kterém směru je hustota pravděpodobnosti největší, resp. nejmenší?

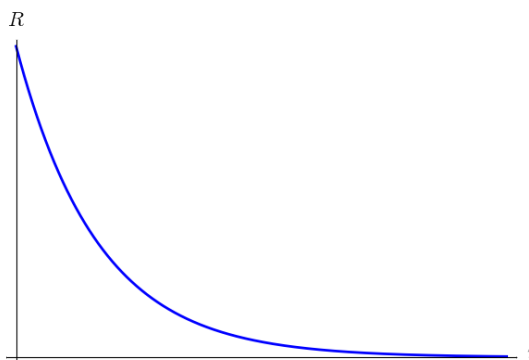


9) Nakreslete polární i „paprskový“ graf, pokud je hustota pravděpodobnosti ve všech směrech stejná.



### Závislost hustoty pravděpodobnosti na vzdálenosti od jádra

Část hustoty pravděpodobnosti závislou na *vzdálenosti od středu atomu* znázorňujeme kartézským grafem, kde na vodorovnou osu vynášíme vzdálenost od jádra<sup>5</sup>.



Obrázek A.2: Graf závislosti části hustoty pravděpodobnosti  $R$  na vzdálenosti od jádra  $r$  pro stav atomu vodíku označovaný jako  $1s$  nebo  $(1, 0, 0)$ .

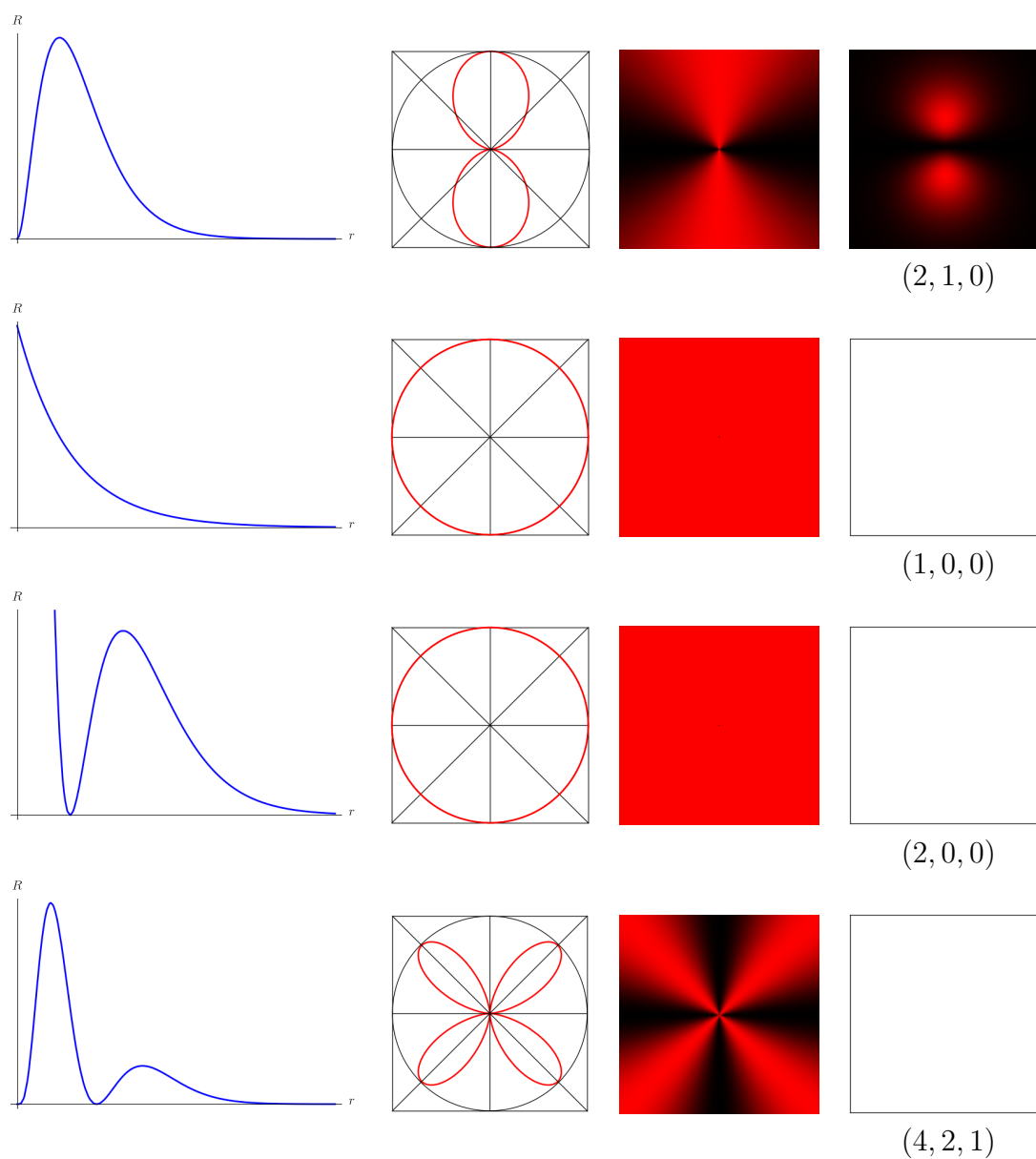
10) Naznačte do grafu výše, v jaké vzdálenosti od jádra je hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu největší, resp. nejmenší.

<sup>5</sup>Nejčastěji v jednotkách Bohrova poloměru  $a = 5 \cdot 10^{-11}$  m. Zde nám však jde jen o průběh dané funkce, proto měřítko neuvádíme.

## Celková hustota pravděpodobnosti

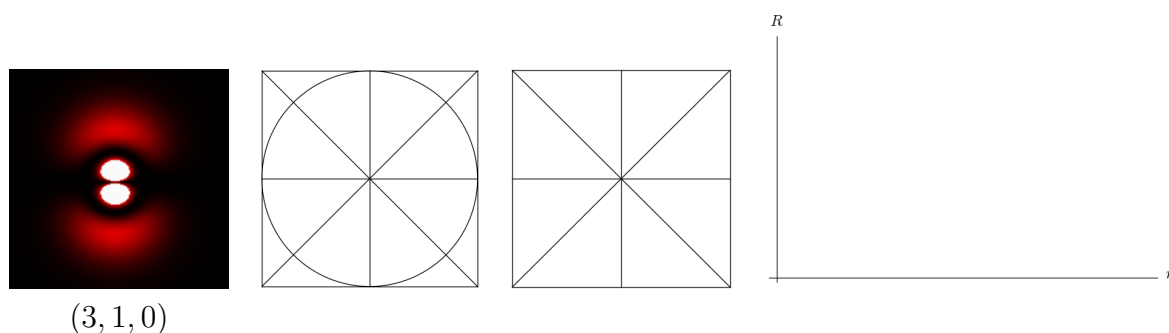
Seznámili jsme se se znázorněním obou částí hustoty pravděpodobnosti pomocí grafů. Zkusme nyní na základě těchto grafů znázornit celkovou hustotu pravděpodobnosti. Využijeme u toho znázornění pomocí intenzity barvy<sup>6</sup> jako v případě komára v místnosti.

11) Na základě části hustoty pravděpodobnosti závislé na vzdálenosti od jádra a úhlové části hustoty pravděpodobnosti (zobrazené polárním i „paprskovým“ grafem) nakreslete do rámečku vpravo celkovou hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu v atomu vodíku pro několik stavů atomu vodíku. Stavů jsou označeny trojicí kvantových čísel  $(n, l, m)$  v závorce. Jde o běžné používané označení, stejné je použito i v apletu.

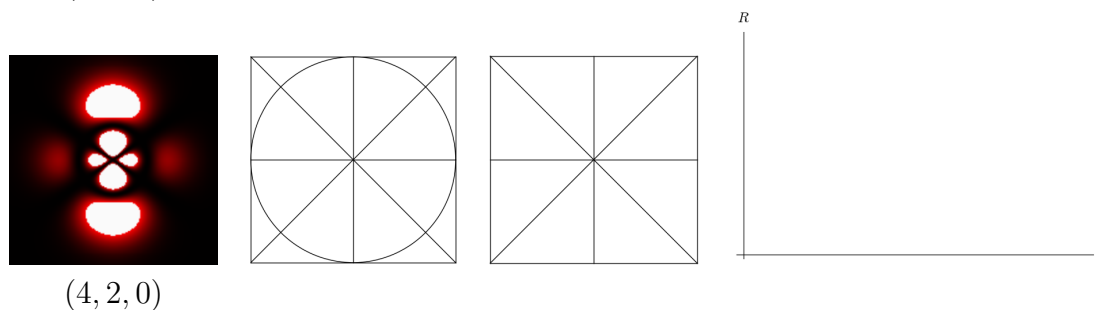
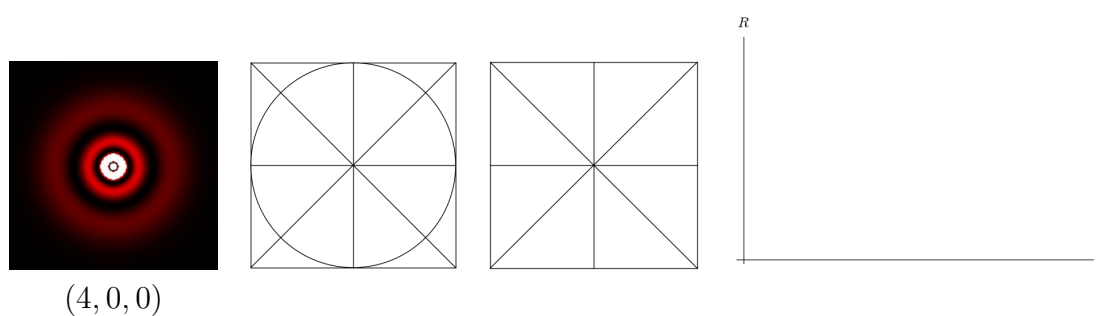


<sup>6</sup>Měřítka barevné škály ani kartézských grafů není na všech obrázcích stejné, lze tedy navzájem porovnávat pouze jejich tvar. Bílá „přepálená“ místa na některých obrázcích vznikla nastavením barevné škály tak, aby byla dobře viditelná i místa s nízkou hustotou pravděpodobnosti, znamenají hustotu pravděpodobnosti větší než je nějaká mezní hodnota.

12) Na základě celkové hustoty pravděpodobnosti načrtněte průběh její úhlové části a části závislé na vzdálenosti od jádra.



13\*) Na základě celkové hustoty pravděpodobnosti načrtněte průběh její úhlové části a části závislé na vzdálenosti od jádra.

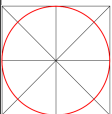
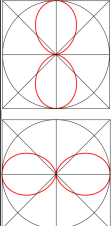
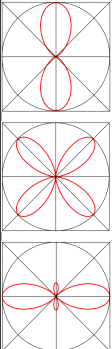
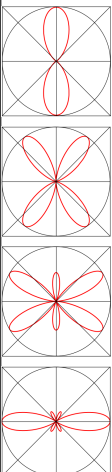
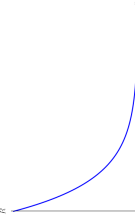

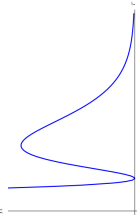
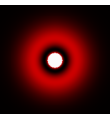
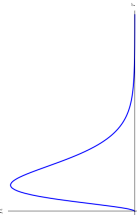
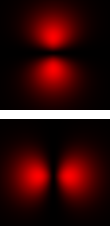
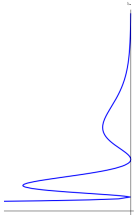
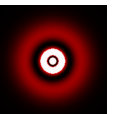

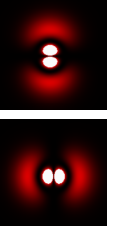
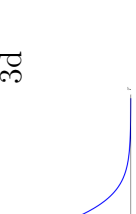
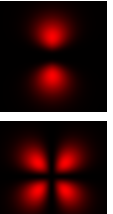
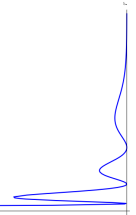
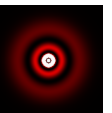
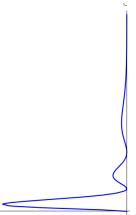

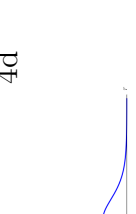
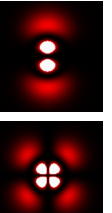
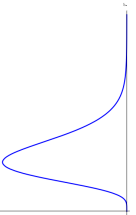
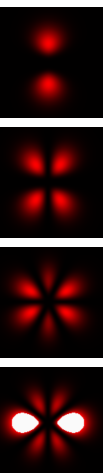


## Prostorová představa orbitalů

Vraťme se ještě ke sférické symetrii atomu vodíku a pokusme se z 2D obrázku hustoty pravděpodobnosti o ní dostat prostorovou představu.

14\*) Podívejte se na své výsledky úkolu 11) a představte si, že je budete otáčet kolem osy  $z$ . Pokuste se vlastními slovy (klidně nematematickými a nefyzikálními) popsat tvary, které tak dostanete. Jde vždy o souvislé oblasti?

15) Na závěr napište vlastními slovy, co podle vás orbital je. Změnila se nějak vaše představa o orbitalech? Co jste si ponechali z původní představy? Co nového jste do ní přidali?

	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
	 $m = 0$	 $m = 0 \quad m = \pm 1$	 $m = 0 \quad m = \pm 1 \quad m = \pm 2$	 $m = 0 \quad m = \pm 1 \quad m = \pm 2 \quad m = \pm 3$
$n = 1$	1s  			
$n = 2$	2s  	2p  		
$n = 3$	3s  	3p  	3d  	
$n = 4$	4s  	4p  	4d  	4f  

Tabulka A.1: Hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu atomu vodíku pro různá kvantová čísla ( $n, l, m$ )

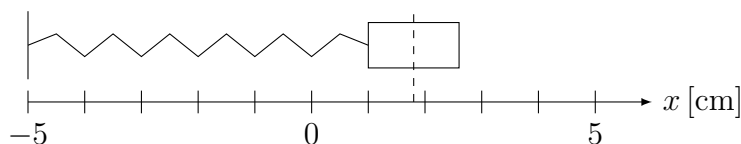
## B. O orbitalech atomu vodíku (zkrácená verze)

1) V chemii jste se setkali s pojmem *orbital*. Napište nejprve vlastními slovy, co podle vás orbital je.

### Popis pomocí pravděpodobnosti

#### 1D: Závaží na pružince

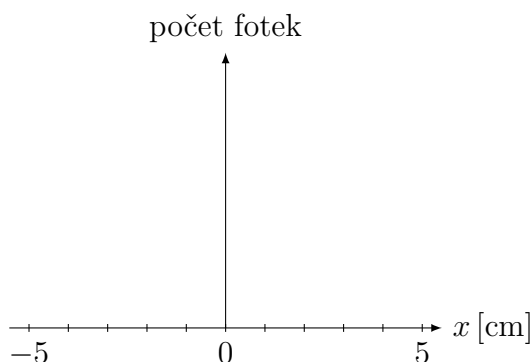
2) Odhadněte, ve kterých místech zachytíme závaží nejčastěji a ve kterých naopak nejméně často. Svůj odhad zapište nebo zakreslete do obrázku s pružinou.



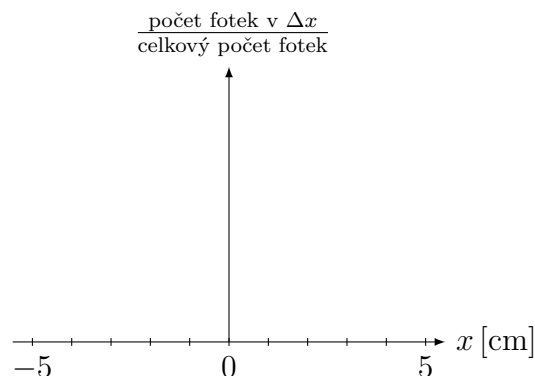
3) Odhadněte, jak bude vypadat sloupcový graf, kde výška sloupce představuje počet fotek závaží v daném intervalu. (Zakreslete do grafu a.)

4) Odhadněte, jak se předchozí graf změní, pokud výšku každého sloupce vydělíme celkovým počtem fotek. (Zakreslete do grafu b.)

a)



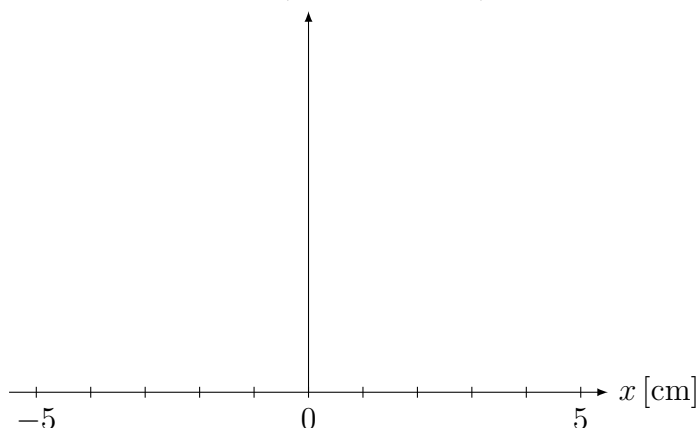
b)



5) Nyní navíc pravděpodobnost vyfocení závaží v daném intervalu vydělíme délkou intervalu. Odhadněte, jak se tento graf bude měnit, pokud budeme postupně zmenšovat velikost intervalu  $\Delta x = 1 \text{ cm}, 1 \text{ mm}, 1 \mu\text{m}, \dots$ ? (Zakreslete do grafu c.)

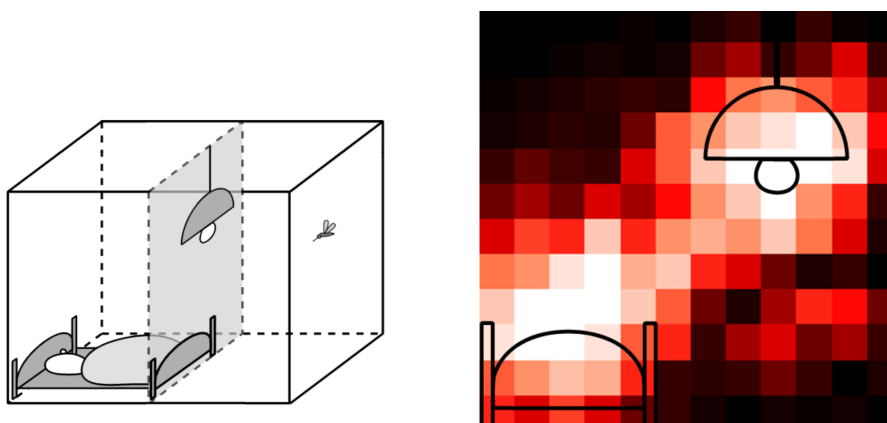
c)

$$\frac{P(\text{vyfocení závaží v } \Delta x)}{\Delta x} \approx \frac{(\text{počet fotek v } \Delta x)}{(\text{celkový počet fotek}) \cdot \Delta x} [\text{cm}^{-1}]$$



### 3D: Komár v místnosti vs. elektron v atomu vodíku

Podívejme se nyní na trojrozměrný případ – budeme se zabývat výskytem komára poletujícího po místnosti a následně budeme zkoumat elektron v atomu.



Obrázek B.1: Snímek polohy komára v místnosti (vlevo) a rozložení hustoty pravděpodobnosti vyfocení komára v jednotkovém objemu v řezu šedou rovinou (vpravo). Bílá barva znázorňuje největší hustotu pravděpodobnosti, odstíny červené nižší a černá nulovou.

6) Ve kterých místech je podle obrázku A.1 nejpravděpodobnější najít komára? Jak to poznáme?

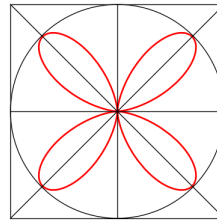
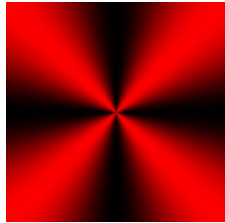
7\*) Navrhněte, co můžeme usoudit z červené oblasti v pravé dolní části obrázku 1.



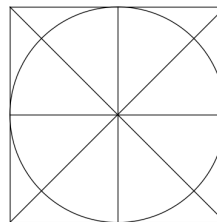
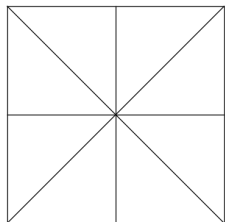
## Orbitaly atomu vodíku

### Závislost hustoty pravděpodobnosti na směru (úhlu)

8) Ve kterém směru je hustota pravděpodobnosti největší, resp. nejmenší?

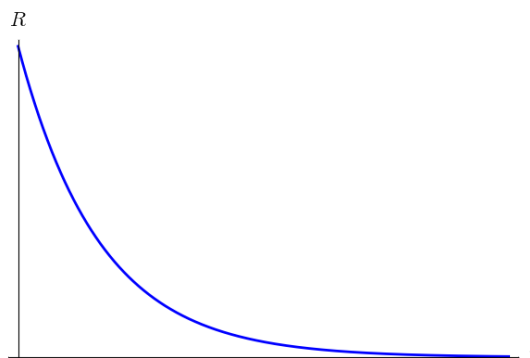


9) Nakreslete polární i „paprskový“ graf, pokud je hustota pravděpodobnosti ve všech směrech stejná.



### Závislost hustoty pravděpodobnosti na vzdálenosti od jádra

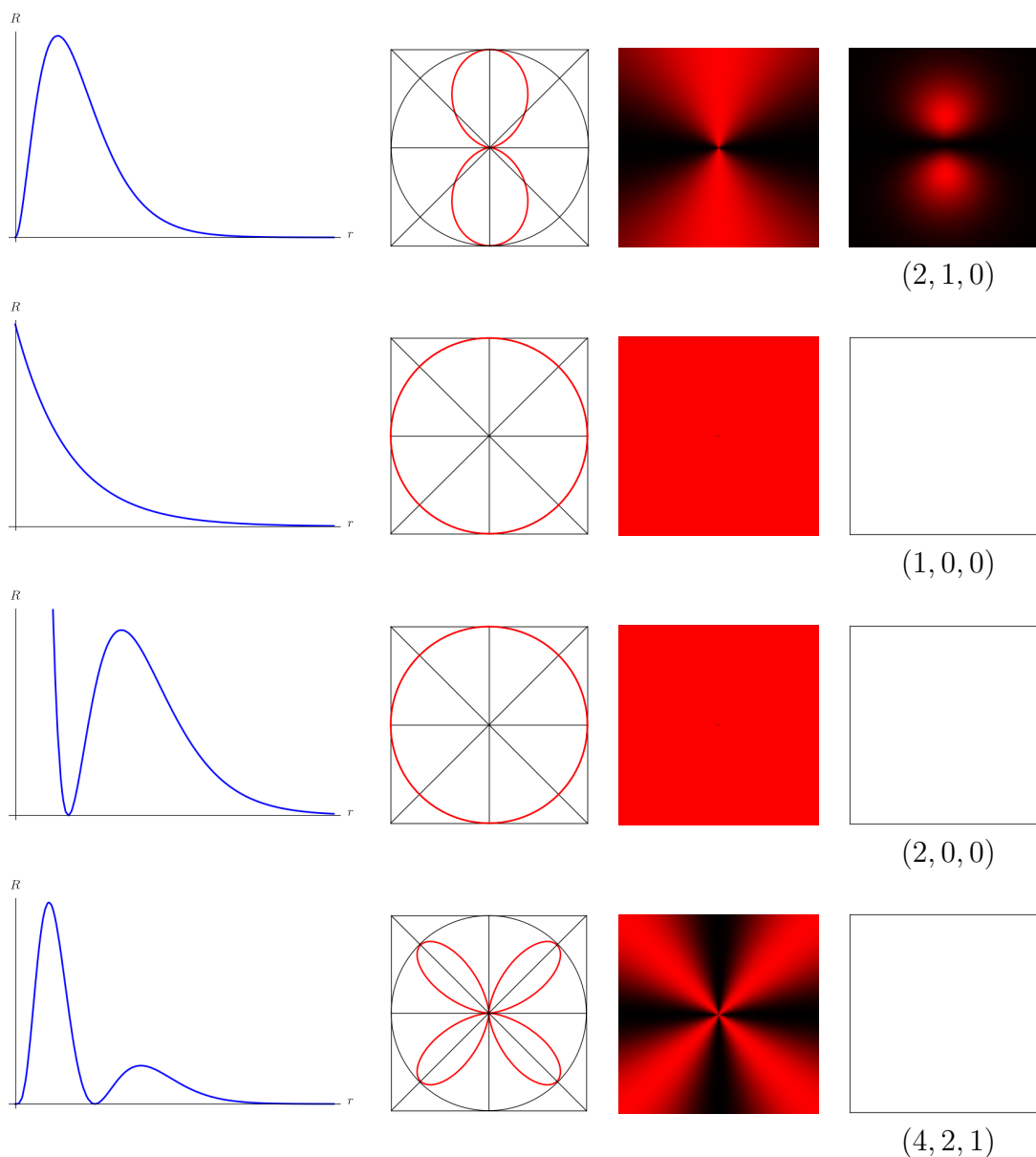
10) Naznačte do grafu níže, v jaké vzdálenosti od jádra je hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu největší, resp. nejmenší.



Obrázek B.2: Graf závislosti části hustoty pravděpodobnosti  $R$  na vzdálenosti od jádra  $r$  pro stav atomu vodíku označovaný jako  $1s$  nebo  $(1, 0, 0)$ . Vzdálenost  $r$  je v jednotkách Bohrova poloměru  $a = 5 \cdot 10^{-11}$  m. Zde nám však jde jen o průběh dané funkce, proto měřítko neuvádíme.

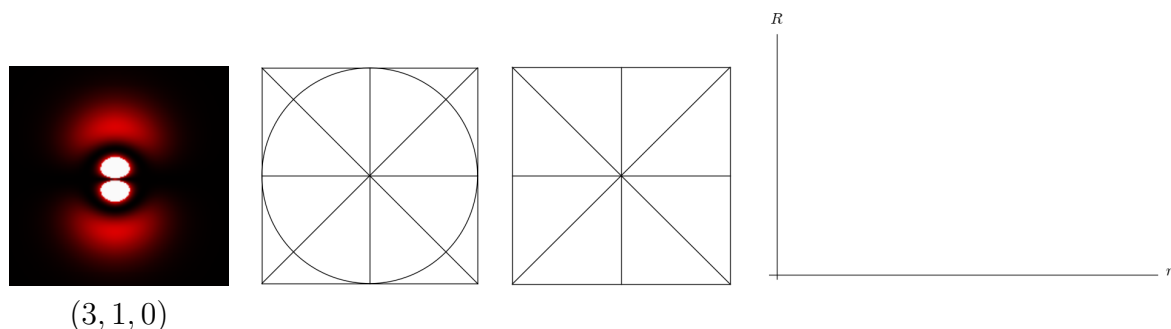
## Celková hustota pravděpodobnosti

11) Na základě části hustoty pravděpodobnosti závislé na vzdálenosti od jádra a úhlové části hustoty pravděpodobnosti (zobrazené polárním i „paprskovým“ grafem) nakreslete do rámečku vpravo celkovou hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu v atomu vodíku pro několik stavů atomu vodíku<sup>1</sup>. Stavů jsou označeny trojicí kvantových čísel  $(n, l, m)$  v závorce. Jde o běžné používané označení, stejné je použito i v apletu.

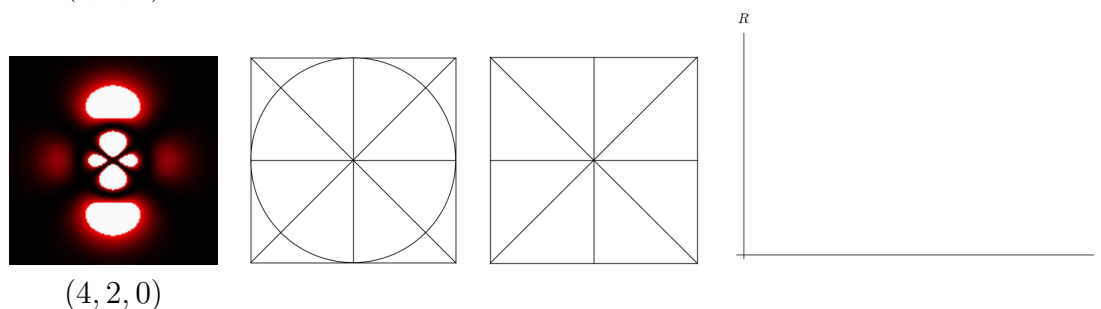
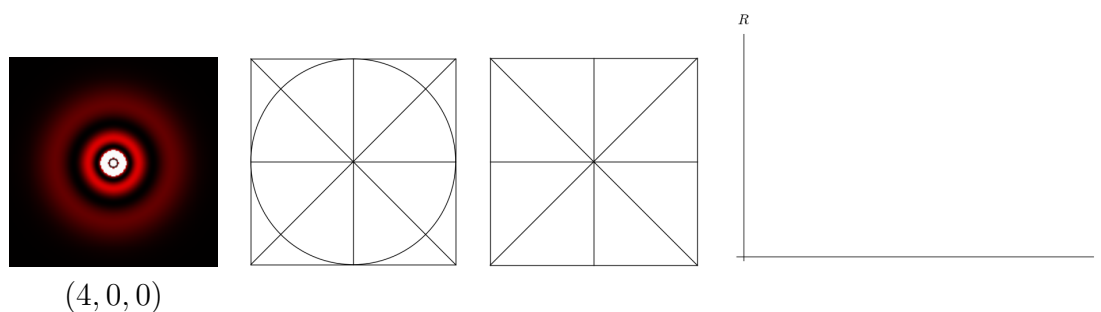


<sup>1</sup>Měřítka barevné škály ani kartézských grafů není na všech obrázcích stejné, lze tedy navzájem porovnávat pouze jejich tvar. Bílá „přepálená“ místa na některých obrázcích vznikla nastavením barevné škály tak, aby byla dobře viditelná i místa s nízkou hustotou pravděpodobnosti, znamená hustotu pravděpodobnosti větší než je nějaká mezní hodnota.

12) Na základě celkové hustoty pravděpodobnosti načrtněte průběh její úhlové části a části závislé na vzdálenosti od jádra.



13\*) Na základě celkové hustoty pravděpodobnosti načrtněte průběh její úhlové části a části závislé na vzdálenosti od jádra.



### Prostorová představa orbitalů

14\*) Podívejte se na své výsledky úkolu 11) a představte si, že je budete otáčet kolem osy  $z$ . Pokuste se vlastními slovy (klidně nematematickými a nefyzikálními) popsat tvary, které tak dostanete. Jde vždy o souvislé oblasti?

15) Na závěr napište vlastními slovy, co podle vás orbital je. Změnila se nějak vaše představa o orbitalech? Co jste si ponechali z původní představy? Co nového jste do ní přidali?



## C. Zpětná vazba k semináři

- Co pro vás byl hlavní poznatek, který si z této hodiny odnášíte?
- Čím pro vás byl seminář přínosný?
- Co bylo překvapivé, zajímavé?
- Co bylo nejhůře srozumitelné?
- Pomohl vám příklad s pružinou v pochopení hustoty pravděpodobnosti?
- Která část hustoty pravděpodobnosti vám připadala snadnější na představu: **úhlová  $U$  / závislá na vzdálenosti od jádra  $R$ ?**
- Který graf pro vás byl srozumitelnější: **polární / „paprskový“?**
- Vyhovovalo vám rozložení pracovního listu? Orientovali jste se v něm snadno? Uvítali byste raději méně textu a jen předtištěné grafy, nebo vám vyhovoval průvodní text?
- Jakékoli další vzkazy a připomínky :)



## D. Úlohy do Sbírky řešených úloh

**Systém energetických hladin atomu vodíku**

Úloha číslo: 4335

Načrtněte na svislou energetickou osu hodnoty povolených energií, tzv. energetické hladiny atomu vodíku. Jak je možné, že je energie záporná?

**Nápověda**

Jaký je vztah pro energii elektronu v atomu vodíku?

**Řešení nápovědy**

Elektron se v atomu vodíku může nacházet v různých stavech, kterým odpovídají různé hodnoty energie. Tyto stavy jsou označovány hlavním kvantovým číslem  $n$ , které může nabývat hodnot  $n = 1, 2, 3, \dots$

Stav s nejnižší hodnotou energie  $E_1 = -13,6 \text{ eV}$  se nazývá základní stav. Stavy s vyššími hodnotami energie než je energie základního stavu se nazývají excitované stavy, jejich energie je dána vztahem

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}.$$

Vidíme, že energie elektronu vázaného v atomu vodíku je kvantovaná – elektron nemůže mít libovolnou energii, ale pouze některou z diskrétních hodnot energie povolených vztahem výše.

**Nápověda 2 – záporná energie**

Uvědomte si nejprve na příkladu klasické částice v elektrostatickém poli, jak souvisí potenciální energie elektrostatického pole se vzdáleností, do kterých se může částice s danou celkovou energií dostat. Stavy s takovou energií, kdy částice nemůže uniknout příliš daleko, nazýváme vázané stavy.

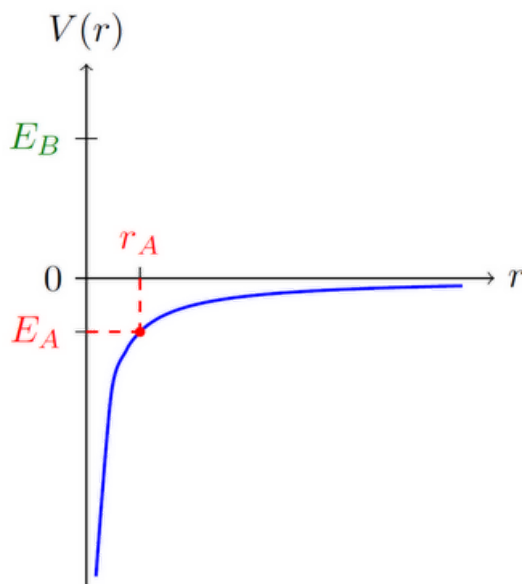
Jaký je průběh potenciální energie částice s nábojem  $e$  v elektrostatickém poli tvořeném jádrem atomu vodíku?

**Řešení nápovědy 2**

Potenciální energie v klasické i kvantové mechanice „omezuje“ pohyb částice a „vymezuje“ tak oblast, do které se částice s danou energií může dostat.

Uvažujme nejprve klasickou částici v elektrostatickém poli, které je tvořeno kladným nábojem jádra atomu vodíku. Na obrázku níže je průběh potenciální energie elektrostatického pole v závislosti na vzdálenosti od jádra. Částice s celkovou energií  $E_A$  by se podle klasické fyziky mohla dostat nejdále do vzdálenosti  $r_A$  od jádra. Na to, aby unikla dále od jádra, nemá dostatečnou energii. V klasické fyzice by tak vázaným stavům odpovídaly stavy s takovou energií, která částici neumožňuje uniknout příliš daleko. Naproti tomu částice s celkovou energií  $E_B$  by měla dostatečnou energii na to, aby unikla do libovolné vzdálenosti od jádra. Takové stavy označujeme jako tzv. rozptylové stavy.





<http://reseneulohy.cz/>

Potenciální energie je určena až na konstantu. Hladinu nulové potenciální energie si tak můžeme zvolit libovolně. Nejčastější a přirozená volba je volba nulové hodnoty potenciální energie v nekonečnu. Potenciální energie částice s nábojem  $e$  v elektrostatickém poli má průběh daný vztahem

$$V(r) = -k \frac{e^2}{r} + c,$$

kde  $c$  je libovolná konstanta. Při volbě  $V(\infty) = 0$  bude mít známý tvar

$$V(r) = -k \frac{e^2}{r}.$$

Díky této volbě odpovídají vázaným stavům záporné hodnoty energie a rozptylovým stavům nezáporné hodnoty energie. Tato volba navíc odpovídá tomu, že energie vázaných stavů systému je energie, kterou musíme částici dodat, abychom ji ze systému uvolnili.

Uvažujme nyní elektron v elektrostatickém poli jádra atomu vodíku. V kvantové mechanice je situace stejná s tím rozdílem, že elektron se může dostat i do oblastí, kam to podle klasické fyziky nejde. Tyto oblasti ale nejsou příliš velké, pravděpodobnost nalezení elektronu v klasicky zakázané oblasti rychle klesá, takže vázaným stavům (tj. stavům kdy se elektron „zdržuje“ jen v blízkosti jádra), také odpovídají záporné energie. Kladné energie by pak odpovídaly elektronu, který může uniknout do libovolné vzdálenosti od jádra, tj. elektronu, který „prolétá kolem jádra“ a není už součástí atomu.

Zásadní rozdíl mezi kvantovým a klasickým případem spočívá v tom, že v kvantovém případě vázané stavy existují jen pro některé diskrétní hodnoty energie, nikoli pro všechny.

### Řešení

Energie elektronu v atomu vodíku je dána vztahem

$$E_n = \frac{E_1}{n^2},$$

kde  $E_1 = -13,6 \text{ eV}$  je energie základního stavu atomu vodíku. Číslo  $n$  je hlavní kvantové číslo, které může nabývat hodnot  $n = 1, 2, 3, \dots$

Pro první excitovaný stav s kvantovým číslem  $n = 2$  po dosazení dostaneme

$$E_2 = \frac{E_1}{2^2} = \frac{-13,6 \text{ eV}}{4} = -3,4 \text{ eV},$$

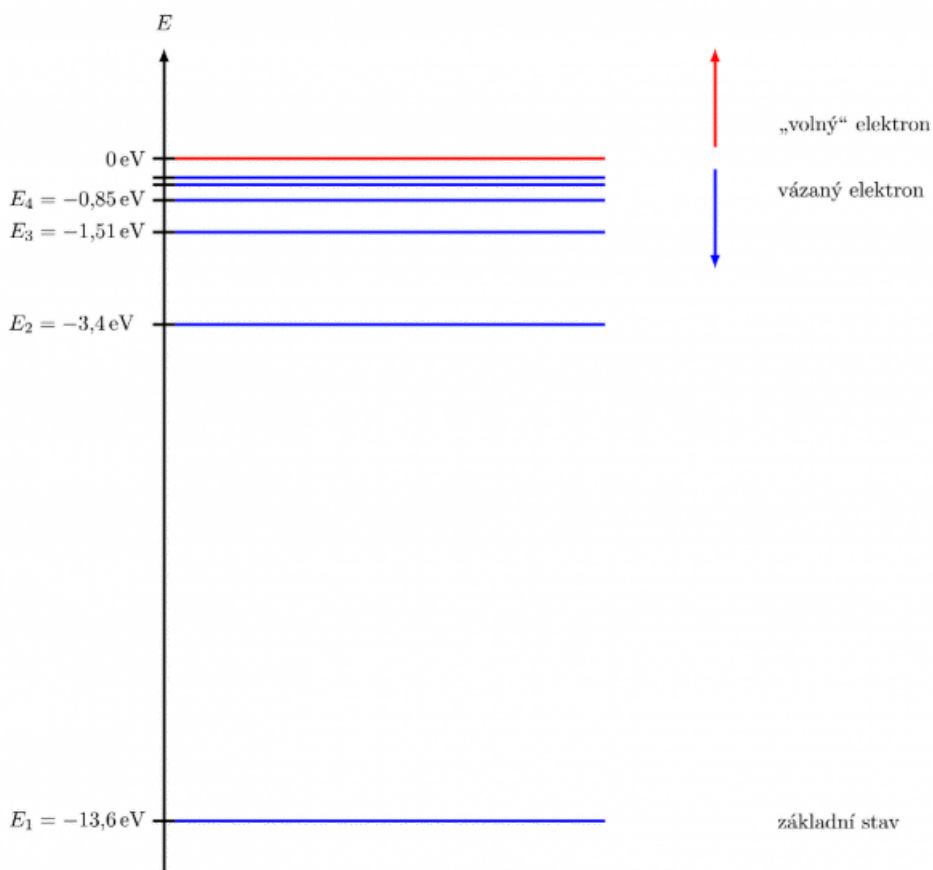
pro třetí excitovaný stav s kvantovým číslem  $n = 3$  dostaneme

$$E_3 = \frac{E_1}{3^2} = \frac{-13,6 \text{ eV}}{9} = -1,51 \text{ eV}.$$

Podobně vypočteme hodnoty energie pro další hlavní kvantová čísla. Energie prvních několika stavů atomu vodíku jsou vypočteny v tabulce níže.

hlavní kvantové číslo $n$	energie $E_n$
$n = 1$	-13,6 eV
$n = 2$	-3,4 eV
$n = 3$	-1,51 eV
$n = 4$	-0,85 eV
$n = 5$	-0,54 eV
$n = 6$	-0,38 eV

Hodnoty energií těchto stavů vyneseme na svislou energetickou osu jako na obrázku níže.



Energie  $E_1, E_2, E_3, \dots$  na obrázku odpovídají vázaným stavům elektronu v atomu vodíku. Je vidět, že s rostoucím  $n$  energie roste jako  $-\frac{1}{n^2}$ , energetické hladiny se zahušťují a limitně se přibližují k hladině s nulovou energií.

Stavy s nezápornou energií by pak odpovídaly elektronu, který „prolétá“ kolem. Tato energie už není kvantovaná, takový elektron může mít libovonou (kladnou) energii.

Energie vázaných stavů je záporná díky volbě nulové hodnoty potenciální energie v nekonečnu, viz Nápo vědu 2. Energie vázaných stavů elektronu v atomu vodíku je energie, kterou musíme elektronu dodat, aby došlo k jeho uvolnění z atomu (tzv. „ionizační energie“).

**Odpověď**

Energetické hladiny atomu vodíku jsou znázorněny na obrázku v Řešení.

Energie vázaných stavů elektronu v atomu vodíku je záporná díky tomu, že jsme zvolili nulovou hodnotu potenciální energie v nekonečnu, jde tedy o naši volbu.

**Odkaz**

Podobným problémem se zabývá také úloha [Energetické hladiny atomu vodíku](#).

**Stupeň degenerace energetických hladin atomu vodíku**

Úloha číslo: 4337

Určete stupeň degenerace  $n$ -té energetické hladiny atomu vodíku vůči kvantovým číslům  $l$  a  $m$

- bez uvažování spinu elektronu,
- se spinem elektronu.

**Nápověda 1**

Degenerace energetické hladiny znamená, že různé vlastní stavy mají stejnou energii. Počet různých vlastních stavů se stejnou energií označujeme jako tzv. stupeň degenerace  $g_n$ .

Energie stavu atomu vodíku je určena hlavním kvantovým číslem  $n$ , ale nezávisí na vedlejším kvantovém čísle  $l$  ani na magnetickém kvantovém čísle  $m$ , ani na spinu elektronu. To znamená, že dva stavy, které mají stejné hlavní kvantové číslo  $n$ , mají stejnou energii, i když se liší v kvantových číslech  $l$  a  $m$  nebo ve spinu elektronu. Naše otázka je tedy stejná, jako kdybychom se ptali, kolik různých stavů atomu vodíku existuje pro dané hlavní kvantové číslo  $n$ .

**Nápověda 2**

Jakých hodnot může nabývat vedlejší kvantové číslo  $l$  pro dané hlavní kvantové číslo  $n$ ?

**Řešení nápovědy 2**

Vedlejší kvantové číslo může nabývat hodnot přirozených čísel včetně nuly a musí splňovat podmínku

$$n > l.$$

Z této podmínky plyne, že pro pevně zvolené hlavní kvantové číslo  $n$  může vedlejší kvantové číslo nabývat hodnot  $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ . Pro každé hlavní kvantové číslo  $n$  tak existuje  $n$  možných hodnot vedlejšího kvantového čísla  $l$ .

**Nápověda 3 – počet možností magnetického kvantového čísla  $m$** 

Jakých hodnot může nabývat magnetické kvantové číslo  $m$  pro danou dvojici kvantových čísel  $n, l$ ?

**Řešení nápovědy 3**

Magnetické kvantové číslo  $m$  může nabývat hodnot celých čísel a musí splňovat podmínku

$$|m| \leq l.$$

Z této podmínky plyne, že pro pevně zvolené hlavní a vedlejší kvantové číslo  $n, l$  může magnetické kvantové číslo nabývat hodnot  $m = -l, \dots, 0, \dots, l$ . Pro každé vedlejší kvantové číslo  $l$  tak existuje  $2l + 1$  možných hodnot magnetického kvantového čísla  $m$ .

**Nápověda 4**

Kolik existuje různých dvojic vedlejšího a magnetického kvantového čísla  $n, l$  pro dané hlavní kvantové číslo  $n$ ?

**Řešení nápovědy 4**

Chceme-li zjistit počet různých dvojic kvantových čísel  $n, l$  pro dané hlavní kvantové číslo  $n$ , projdeme postupně možné hodnoty vedlejšího kvantového čísla  $l$  a sečteme počet možných hodnot magnetického

kvantového čísla  $m$  pro každé z nich. Již víme, že pro dané vedlejší kvantové číslo  $l$  máme  $2l + 1$  možných hodnot magnetického kvantového čísla  $m$ , dostaneme tedy součet aritmetické řady

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1).$$

### Nápověda 5 – součet aritmetické posloupnosti

Součet prvních  $N$  členů aritmetické posloupnosti

$$\sum_{i=0}^N a_i = a_0 + a_1 + a_2 + \dots + a_N$$

můžeme vypočítat podobně jako malý Gauss ve známém příběhu, který si uvědomil, že součet prvního a posledního členu, druhého a předposledního členu atd. je vždy stejný. Takových dvojic se stejným součtem je dohromady  $\frac{N}{2}$ .

Součet prvních  $N$  členů aritmetické posloupnosti tedy můžeme zapsat jako

$$\sum_{i=0}^N a_i = \frac{N}{2}(a_0 + a_N).$$

### Řešení a)

Degenerace znamená, že různé vlastní stavy mají stejnou energii. Počet různých vlastních stavů se stejnou energií označujeme jako tzv. stupeň degenerace  $g_n$ .

Energie stavu atomu vodíku je určena hlavním kvantovým číslem  $n$  a nezávisí na vedlejším kvantovém čísle  $l$ , na magnetickém kvantovém čísle  $m$  a na spinu elektronu. To znamená, že dva stavy, které mají stejné hlavní kvantové číslo  $n$ , mají stejnou energii, i když se liší v kvantových číslech  $l$  a  $m$  nebo ve spinu elektronu. Naše otázka je tedy stejná, jako kdybychom se ptali, kolik různých stavů atomu vodíku existuje pro dané hlavní kvantové číslo  $n$ .

Nejprve se podívejme na počet možností vedlejšího kvantového čísla  $l$  pro dané hlavní kvantové číslo  $n$ .

Vedlejší kvantové číslo může nabývat hodnot přirozených čísel včetně nuly a musí splňovat podmínku

$$n > l.$$

Z této podmínky plyne, že pro pevně zvolené hlavní kvantové číslo  $n$  může vedlejší kvantové číslo nabývat hodnot  $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ . Pro každé hlavní kvantové číslo  $n$  tak existuje  $n$  možných hodnot vedlejšího kvantového čísla  $l$ .

Nyní se podívejme na počet možných hodnot magnetického kvantového čísla  $m$  pro danou dvojici kvantových čísel  $n, l$ .

Magnetické kvantové číslo  $m$  může nabývat hodnot celých čísel a musí splňovat podmínku

$$|m| \leq l.$$

Z této podmínky plyne, že pro pevně zvolené hlavní a vedlejší kvantové číslo  $n, l$  může magnetické kvantové číslo nabývat hodnot  $m = -l, \dots, 0, \dots, l$ . Pro každé vedlejší kvantové číslo  $l$  tak existuje  $2l + 1$  možných hodnot magnetického kvantového čísla  $m$ .

Chceme-li zjistit stupeň degenerace  $g_n$ , musíme určit počet různých dvojic vedlejšího a magnetického kvantového čísla  $l, m$  pro pevně zvolené hlavní kvantové číslo  $n$ , který odpovídá počtu všech možných různých stavů elektronu v atomu vodíku. Projdeme postupně možné hodnoty vedlejšího kvantového čísla  $l$  a sečteme počet možných hodnot magnetického kvantového čísla  $m$  pro každé z nich. Již víme, že pro dané vedlejší kvantové číslo  $l$  máme  $2l + 1$  možných hodnot magnetického kvantového čísla  $m$ , dostaneme tedy součet aritmetické řady

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1).$$

Součet této aritmetické posloupnosti můžeme vypočítat jako

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{n}{2}(1 + 2(n-1) + 1) = n^2.$$

Stupeň degenerace každé energetické hladiny atomu vodíku vůči kvantovým číslům  $l$  a  $m$  je tedy  $n^2$ .

#### Nápověda b)

Kolik možných hodnot průmětu spinu do zvoleného směru má elektron v atomu vodíku?

#### Řešení nápovědy b)

Elektron v atomu vodíku má dvě možnosti průmětu spinu do libovolné zvoleného směru  $\pm \frac{\hbar}{2}$ . Nejčastěji volíme průmět do osy  $z$ .

#### Řešení b)

Pro každý stav popsaný kvantovými čísly  $(n, l, m)$  má elektron dvě možnosti průmětu spinu  $\pm \frac{\hbar}{2}$ . Každý stav tak při uvažování spinu dostaneme ve dvou variantách, které se někdy označují jako stavy s průmětem spinu „nahoru“ nebo „dolů“.

Degenerace  $n$ -té energetické hladiny tak bude dvojnásobná oproti případu, ve kterém jsme neuvažovali spin, tedy  $2n^2$ .

#### Odpověď

- a) Stupeň degenerace  $n$ -té energetické hladiny atomu vodíku vůči kvantovým číslům  $l$  a  $m$  bez uvažování spinu elektronu je  $n^2$ .
- b) Stupeň degenerace  $n$ -té energetické hladiny atomu vodíku vůči kvantovým číslům  $l$  a  $m$  při uvažování spinu elektronu je  $2n^2$ .

#### Komentář

V této úloze jsme pracovali s takovým modelem atomu vodíku, ve kterém energie závisela pouze na hlavním kvantovém čísle  $n$ . Při použití přesnějšího modelu atomu vodíku (např. při uvažování relativistických efektů, spin-orbitální interakce a interakce spinu elektronu se spinem jádra) energie závisí kromě hlavního kvantového čísla také na dalších kvantových číslech a degenerace energetických hladin vůči kvantovým číslům  $l$  a  $m$  tedy částečně nebo zcela mizí.

**Pravděpodobnost nalezení elektronu v jádře**

Úloha číslo: 4339

Elektron v základním stavu atomu vodíku je popsán vlnovou funkcí

$$\Psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}},$$

kde  $a = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} \approx 0,5 \cdot 10^{-11}$  m je tzv. Bohrovův poloměr.

Určete pravděpodobnost, že takový elektron nalezneme v oblasti zaujímané jádrem, tedy uvnitř koule o poloměru  $d = 10^{-15}$  m.

**Začátek řešení**

Pravděpodobnost nalezení elektronu v dané oblasti získáme integrací hustoty pravděpodobnosti  $|\Psi|^2$  přes tuto oblast. V případě atomu vodíku budeme integrovat ve sférických souřadnicích.

Pravděpodobnost, že se elektron v základním stavu atomu vodíku nachází uvnitř koule o poloměru  $d$ , je

$$P = \int_0^d \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\Psi_{100}(r)|^2 r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, dr.$$

Po dosazení dostáváme

$$P = \int_0^d \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, dr.$$

Díky separovatelnosti proměnných můžeme tento trojný integrál upravit na součin tří jednoduchých integrálů:

$$P = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^d r^2 e^{-\frac{2r}{a}} \, dr.$$

**Nápověda – jak integrovat**

Výpočet integrálu je popsán v nápovědě v úloze [Elektron mezi kulovými plochami](#).

**Pokračování řešení**

Došli jsme k tomu, že pravděpodobnost, že se elektron v základním stavu atomu vodíku nachází uvnitř koule o poloměru  $d$ , je rovna

$$P = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^d r^2 e^{-\frac{2r}{a}} \, dr.$$

Integrály přes oba úhly jsou velmi jednoduché,

$$P = \frac{1}{\pi a^3} \cdot 2\pi \cdot [-\cos \theta]_0^\pi \cdot \int_0^d r^2 e^{-\frac{2r}{a}} \, dr.$$

Integrál přes  $r$  lze po substituci  $x = -\frac{2r}{a}$  spočítat metodou per partes (detailně viz nápověda). Po dosazení správných mezí tak dostáváme

$$P = \frac{1}{\pi a^3} \cdot 2\pi \cdot 2 \cdot \left(-\frac{a^3}{8}\right) \cdot [(x^2 - 2x + 2)e^x]_0^{-\frac{2d}{a}},$$

$$P = \frac{1}{2} [(x^2 - 2x + 2) e^x]_{-\frac{2d}{a}}^0,$$

$$P = \frac{1}{2} [2 - (\frac{2d}{a})^2 + 2(\frac{2d}{a}) + 2] e^{-\frac{2d}{a}}.$$

### Nápověda – numerické dosazení

Dosazení číselných hodnot je v tomto případě za hranicemi numerických schopností běžné kalkulačky či Excelu. Pro přibližný výpočet číselné hodnoty pravděpodobnosti použijte Taylorův rozvoj exponenciály  $e^x$  a zjednodušte výraz v hranatých závorkách.

### Numerické dosazení

Pro výpočet číselné hodnoty pravděpodobnosti využijeme Taylorův rozvoj exponenciální funkce kolem nuly  $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$

Výraz

$$(x^2 - 2x + 2) e^x$$

tak s využitím rozvoje do třetího řádu zjednodušíme na

$$\begin{aligned} (x^2 - 2x + 2) \left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!}\right) &\approx \\ &\approx (x^2 + x^3 - 2x - 2x^2 - x^3 - 2 + 2x + x^2 + \frac{x^3}{3}) = 2 + \frac{x^3}{3}. \end{aligned}$$

Do vztahu pro pravděpodobnost tak můžeme dosadit  $x = -\frac{2r}{a}$  a získáme vztah

$$P \approx \frac{1}{2} [2 - (2 + \frac{x^3}{3})] = \frac{4}{3} \left(\frac{d}{a}\right)^3.$$

Po dosazení číselných hodnot  $a = 5 \cdot 10^{-11}$  a  $d = 10^{-15}$  dostaneme

$$P \approx \frac{4}{3} \left(\frac{10^{-15}}{5 \cdot 10^{-11}}\right)^3 \approx 10^{-14}.$$

### Odpověď

Pravděpodobnost nalezení elektronu uvnitř oblasti zaujímané jádrem je pro základní stav atomu vodíku extrémně malá, a to přibližně  $10^{-14}$ .

### Odkaz

Velmi podobnou situaci řeší také úlohy [Elektron mezi kulovými plochami](#), [Elektron vně koule](#) a [Pravděpodobnost nalezení elektronu za Bohrovým poloměrem](#).



**„Balmerova“ série pro ion helia He<sup>+</sup>**

Úloha číslo: 4340

Uvažujme ion helia He<sup>+</sup>. Porovnejte „Balmerovu“ sérii helia s Balmerovou sérií vodíku, která je ve viditelném spektru. Jako Balmerovu sérii označujeme přechody z vyšší enegetické hladiny na hladinu s hlavním kvantovým číslem  $n = 2$ .

**Nápověda 1**

Jaký vztah platí pro energii elektronu ve vodíku podobném atomu, tj. v atomu s protonovým číslem  $Z$  a s jedním elektronem? Jaká je energie základního stavu ionu helia?

**Řešení nápovědy 1**

Pro každý vodíku podobný atom má vztah pro energii podobný tvar jako pro atom vodíku, liší se pouze protonovým číslem  $Z$ , které určuje náboj jádra.

Pro energetické hladiny vodíku podobného atomu platí

$$E_n = \frac{E_1}{n^2},$$

kde

$$E_1 = -Z^2 \frac{(ke^2)^2 m_e}{2\hbar^2}$$

je energie základního stavu atomu,  $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$  elektrostatická konstanta,  $m_e$  je hmotnost elektronu a  $e$  náboj elektronu.

Vidíme, že energie základního stavu závisí na náboji jádra. Atomy s vyšším protonovým číslem  $Z$  mají více nabitě jádro a elektrony jsou tak k němu více přitahovány, proto má základní stav v absolutní hodnotě větší energii.

Pro atom vodíku s jedním protonem je  $Z = 1$ .

Helium má protonové číslo  $Z = 2$ , hodnota energie základního stavu ionu helia je tedy

$$E_1^{\text{He}^+} = -2^2 \frac{(ke^2)^2 m_e}{2\hbar^2} = -4 \frac{(ke^2)^2 m_e}{2\hbar^2} = -4 E_1^{\text{H}} = 4(-13,6 \text{ eV}) = -54,4 \text{ eV},$$

což je čtyřnásobek energie základního stavu atomu vodíku.

**Nápověda 2**

Jak spolu souvisí vlnová délka fotonu, který byl vyzářen při přechodu elektronu v atomu z jednoho stavu do druhého, a rozdíl energií, které odpovídají těmto dvěma stavům?

**Řešení nápovědy 2**

Energetické hladiny v atomu vodíku a přechody mezi nimi jsou podrobně popsány v nápovědě u úlohy [Energetické hladiny atomu vodíku](#).

Energie fotonu vyzářeného při přechodu elektronu z jedné energetické hladiny na druhou (označme je hlavními kvantovými čísly  $n_A, n_B$ ) je dána rozdílem energií těchto hladin. V atomu podobném vodíku je tento rozdíl roven

$$\Delta E_{AB} = E_A - E_B = \frac{E_1}{n_A^2} - \frac{E_1}{n_B^2} = E_1 \left( \frac{1}{n_A^2} - \frac{1}{n_B^2} \right),$$

kde  $E_1$  je energie základního stavu daného atomu.

Energie vyzářeného fotonu je přímo úměrná frekvenci fotonu a nepřímo úměrná jeho vlnové délce, tj. větší energie fotonu odpovídá kratší vlnové délce.

Abychom mohli rozhodnout, jestli bude energie fotonů vyzářených při přechodech z jedné energetické hladiny na druhou větší pro atom vodíku nebo pro ion helia, musíme porovnat rozdíly energií mezi jednotlivými hladinami ionu helia a atomu vodíku.

### Řešení

Jako spektrální série označujeme přechody elektronu v atomu z vyšší energetické hladiny na hladinu s pevně zvoleným hlavním kvantovým číslem  $n$ . Při těchto přechodech je vyzářen foton o určité vlnové délce.

Energie fotonu vyzářeného při přechodu elektronu z jedné energetické hladiny na druhou (označme je hlavními kvantovými čísly  $n_A, n_B$ ) je dána rozdílem energií těchto hladin. V atomu podobnému vodíku je tento rozdíl roven

$$\Delta E_{AB} = E_A - E_B = \frac{E_1}{n_A^2} - \frac{E_1}{n_B^2} = E_1 \left( \frac{1}{n_A^2} - \frac{1}{n_B^2} \right),$$

kde  $E_1$  je energie základního stavu atomu.

Energie vyzářeného fotonu je přímo úměrná frekvenci fotonu a nepřímo úměrná vlnové délce fotonu, větší energie tak odpovídá kratší vlnové délce.

Abychom mohli rozhodnout, jestli bude energie fotonů vyzářených při přechodech z jedné energetické hladiny na druhou větší pro atom vodíku nebo pro ion helia, musíme porovnat rozdíly energií mezi jednotlivými hladinami ionu helia a atomu vodíku. K tomu potřebujeme znát hodnotu energie základního stavu pro ion helia a atom vodíku  $E_1^{\text{He}^+}$  a  $E_1^{\text{H}}$ .

Vodík i ion helia He<sup>+</sup> jsou atomy tvořené jádrem a jedním elektronem. Počet protonů v jádře určuje protonové číslo  $Z$ . Takové atomy nazýváme tzv. vodíku podobné atomy.

Pro každý vodíku podobný atom má vztah pro energii tvar

$$E_n = \frac{E_1}{n^2},$$

kde

$$E_1 = -Z^2 \frac{(ke^2)^2 m_e}{2\hbar^2}$$

je energie základního stavu atomu,  $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$  je elektrostatická konstanta,  $m_e$  hmotnost elektronu a  $e$  náboj elektronu.

Vidíme, že energie základního stavu závisí na náboji jádra. Atomy s vyšším protonovým číslem  $Z$  mají více nabitě jádro a elektrony jsou tak k němu více přitahovány, proto má základní stav v absolutní hodnotě větší energii.

Pro atom vodíku s protonovým číslem  $Z = 1$  je energie základního stavu

$$E_1^{\text{H}} = -\frac{(ke^2)^2 m_e}{2\hbar^2} = -13,6 \text{ eV}.$$

Helium má protonové číslo  $Z = 2$ , hodnota energie základního stavu ionu helia je tedy

$$E_1^{\text{He}^+} = -2^2 \frac{(ke^2)^2 m_e}{2\hbar^2} = -4 \frac{(ke^2)^2 m_e}{2\hbar^2} = -4 E_1^{\text{H}} = 4(-13,6 \text{ eV}) = -54,4 \text{ eV},$$

což je čtyřnásobek energie základního stavu atomu vodíku.

Rozdíl mezi energetickými hladinami označenými hlavními kvantovými čísly  $n_A$ ,  $n_B$  pro atom vodíku je

$$\Delta E_{AB}^H = E_1^H \left( \frac{1}{n_A^2} - \frac{1}{n_B^2} \right) = -13,6 \text{ eV} \cdot \left( \frac{1}{n_A^2} - \frac{1}{n_B^2} \right)$$

a pro ion helia

$$\Delta E_{AB}^{\text{He}^+} = E_1^{\text{He}^+} \left( \frac{1}{n_A^2} - \frac{1}{n_B^2} \right) = -54,4 \text{ eV} \cdot \left( \frac{1}{n_A^2} - \frac{1}{n_B^2} \right).$$

Rozdíl mezi každými dvěma energetickými hladinami ionu helia tak bude v absolutní hodnotě čtyřikrát větší než rozdíl odpovídajících hladin u atomu vodíku. Proto budou mít fotony vyzářené při přechodech v ionu helia čtyřikrát větší frekvenci a kratší vlnovou délku než fotony odpovídajících přechodů v atomu vodíku.

„Balmerova“ série, spolu s ostatními sériemi, tak bude oproti příslušným sériím v atomu vodíku posunuta ke kratším vlnovým délkám, tedy směrem k ultrafialové části spektra.

#### **Odpověď**

„Balmerova“ série je oproti Balmerově sérii atomu vodíku posunuta ke kratším vlnovým délkám, tedy směrem k ultrafialové části spektra.

**Spektrum pozitronia**

Úloha číslo: 4353

Pozitronium je vázaný systém elektronu a pozitronu (pozitron je antičástice elektronu, má opačný náboj a stejnou hmotnost jako elektron). Tento exotický vázaný stav, který je podobný atomu vodíku, je velmi nestabilní.

- Rozhodněte, zda je pro určení energetických hladin atomu vodíku, resp. pozitronia potřeba uvažovat redukovanou hmotnost.
- Určete energii základního stavu pozitronia.
- Určete vlnovou délku fotonu vyzářeného při přechodu pozitronia z prvního excitovaného stavu do základního stavu.
- Porovnejte tuto vlnovou délku s odpovídajícím přechodem v atomu vodíku v Lymanově sérii.

**Teorie – redukovaná hmotnost**

Pozitronium je atom podobný vodíku – jde o kladně nabitě jádro s jedním elektronem (s tím rozdílem, že místo protonu je jádro tvořeno pozitronem). Vztah pro energii elektronu v atomu pozitronia proto bude podobný jako pro atom vodíku. Energie  $n$ -té energetické hladiny je

$$E_n = \frac{E_1}{n^2},$$

kde  $E_1$  je energie základního stavu.

Při odvození vztahu pro energii nahlížíme na systém elektronu a jádra jako na problém dvou těles, resp. problém dvou hmotných bodů podobně jako v teoretické mechanice. Místo pohybu elektronu a jádra vůči okolí tak řešíme zvlášť pohyb jejich hmotného středu (v atomu s velmi hmotným jádrem je hmotný střed v podstatě na stejném místě jako jádro) a zvlášť relativní pohyb elektronu vůči jádru (při velmi těžkém jádře lze tento relativní pohyb ztotožnit s pohybem elektronu vůči okolí). Stejně jako v teoretické mechanice nahrazujeme hmotnost elektronu  $m_e$  tzv. redukovanou hmotností

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

a hmotnost jádra  $m_J$  celkovou hmotností atomu

$$M = m_e + m_J.$$

Vztah pro energii základního stavu pak má tvar

$$E_1 = -\frac{(ke^2)^2 \mu}{2\hbar^2}.$$

**Nápověda a)**

Porovnejte redukovanou hmotnost a hmotnost elektronu

i) v případě atomu vodíku,

ii) v případě pozitronia.

Je relativní rozdíl mezi redukovanou hmotností a hmotností elektronu v obou případech srovnatelný s přesností, která stačí pro určení energetických hladin?

**Řešení a) i)**

V případě atomu vodíku je hmotnost jádra  $m_J$  přibližně dvoutisíckrát větší než hmotnost elektronu,  $m_J = 2000 m_e$ .

Redukovanou hmotnost pro atom vodíku  $\mu_H$  vypočteme jako

$$\mu_H = \frac{m_J m_e}{m_J + m_e} = \frac{2000 m_e^2}{2001 m_e} \doteq 0,9995 m_e .$$

Rozdíl redukované hmotnosti a hmotnosti elektronu je

$$\Delta\mu_H = m_e - \mu_H = m_e - 0,9995 m_e = 0,0005 m_e ,$$

a jejich relativní rozdíl je

$$\frac{\Delta\mu_H}{m_e} = 0,0005 .$$

Tyto dvě hmotnosti se tak liší řádově o desetiny promile.

Tento rozdíl lze pro první přiblížení zanedbat a při určování hodnot energií atomu vodíku uvažovat místo redukované hmotnosti pouze hmotnost elektronu.

### Řešení a) ii)

V případě pozitronia je hmotnost jádra i elektronu stejná,  $m_J = m_e$ .

Redukovanou hmotnost pro pozitronium  $\mu_P$  vypočteme jako

$$\mu_P = \frac{m_e m_e}{m_e + m_e} = \frac{m_e^2}{2m_e} = \frac{m_e}{2} .$$

Rozdíl redukované hmotnosti a hmotnosti elektronu je

$$\Delta\mu_P = m_e - \mu_P = m_e - \frac{m_e}{2} = \frac{m_e}{2} ,$$

hmotnost elektronu je tak dvojnásobná v porovnání s redukovanou hmotností.

Tento rozdíl už není zanedbatelný, proto musíme při určování hodnot energií pozitronia uvažovat redukovanou hmotnost a ne pouze hmotnost elektronu.

### Řešení b)

V předchozí části jsme ukázali, že při určování energie stavů pozitronia musíme uvažovat redukovanou hmotnost místo hmotnosti elektronu, protože v případě pozitronia neplatí, že by hmotnost jádra byla mnohem větší než hmotnost elektronu, jako tomu bylo v případě atomu vodíku.

Energie základního stavu pozitronia je dána vztahem

$$E_1^P = -\frac{(ke^2)^2 \mu_P}{2\hbar^2} = -\frac{1}{2} \frac{(ke^2)^2 m_e}{2\hbar^2} ,$$

kde  $\mu_P = \frac{m_e}{2}$  je redukovaná hmotnost pro pozitronium.

Všimněme si, že výraz

$$-\frac{(ke^2)^2 m_e}{2\hbar^2}$$

je energie základního stavu atomu vodíku

$$E_1^H = -13,6 \text{ eV}.$$

V případě atomu vodíku lze místo redukované hmotnosti použít hmotnost elektronu  $m_e$  a přesnost bude přesto dostačující. Energii základního stavu pozitronia tak můžeme vypočítat jako

$$E_1^P = \frac{E_1^H}{2} = \frac{-13,6 \text{ eV}}{2} = -6,8 \text{ eV}.$$

### Nápověda c)

Přechody mezi energetickými hladinami atomu a souvislost se spektrem atomu je popsána v Nápovědě 2 u úlohy „Balmerova“ série pro ion helia  $\text{He}^+$ .

### Řešení c)

Energie fotonu vyzářeného při přechodu elektronu v pozitroniu z jedné energetické hladiny na druhou (označme je hlavními kvantovými čísly  $n_A, n_B$ ) je

$$\Delta E_{AB} = E_A - E_B = \frac{E_1^P}{n_A^2} - \frac{E_1^P}{n_B^2} = E_1^P \left( \frac{1}{n_A^2} - \frac{1}{n_B^2} \right),$$

kde  $E_1^P$  je energie základního stavu pozitronia.

Foton vyzářený při přechodu elektronu pozitronia z prvního excitovaného stavu s  $n_B = 2$  do základního stavu s  $n_A = 1$  má energii

$$\Delta E_{AB} = E_1^P \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{3}{4} E_1^P = \frac{3}{4} \cdot 6,8 \text{ eV} = 5,1 \text{ eV}.$$

Mezi energií vyzářeného fotonu, jeho frekvencí a vlnovou délkou a rychlostí světla platí vztah

$$\Delta E_{AB} = hf = h \frac{c}{\lambda}.$$

Vlnová délka fotonu vyzářeného při přechodu z prvního excitovaného do základního stavu pozitronia tak je

$$\lambda = h \frac{c}{\Delta E_{AB}}.$$

Po číselném dosazení a převedení energie z elektronvoltů na základní jednotku dostaneme vlnovou délku

$$\lambda = 6,626 \cdot 10^{-34} \cdot \frac{3 \cdot 10^8}{(5,1 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19})} \doteq 243 \text{ nm}.$$

Vidíme, že vlnová délka přechodu z prvního excitovaného do základního stavu pozitronia spadá do ultrafialového spektra.

### Řešení d)

Rozdíl energie mezi prvním excitovaným stavem a základním stavem atomu vodíku je

$$\Delta E_{AB} = E_1^H \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{3}{4} E_1^H = \frac{3}{4} \cdot 13,6 \text{ eV} = 10,2 \text{ eV},$$

je tedy dvojnásobný než v případě pozitronia.

Foton vyzářený při tomto přechodu tak má dvojnásobnou energii než by měl elektron v odpovídajícím přechodu v pozitroniu.

Mezi energií vyzářeného fotonu, jeho frekvencí a vlnovou délkou a rychlostí světla platí vztah

$$\Delta E_{AB} = hf = h \frac{c}{\lambda} .$$

Vlnová délka fotonu vyzářeného při přechodu z prvního excitovaného do základního stavu atomu vodíku tak je

$$\lambda = h \frac{c}{\Delta E_{AB}} .$$

Po číselném dosazení a převedení energie z elektronvoltů na základní jednotku dostaneme vlnovou délku

$$\lambda = 6,626 \cdot 10^{-34} \cdot \frac{3 \cdot 10^8}{(10,2 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19})} \approx 122 \text{ nm} .$$

Vlnová délka přechodu z prvního excitovaného do základního stavu atomu vodíku v Lymanově sérii spadá také do ultrafialového spektra a má ještě kratší vlnovou délku než odpovídající přechod pro pozitronium.

### Odpověď

a) V případě pozitronia je, na rozdíl od atomu vodíku, potřeba uvažovat redukovanou hmotnost místo hmotnosti elektronu, protože jádro pozitronia a elektron mají stejnou hmotnost. Nemůžeme tak jádro považovat za nekonečně těžké, jako tomu je v případě atomu vodíku, kdy je jádro asi dvoutisíckrát těžší než elektron.

Relativní rozdíl mezi hmotností elektronu a redukovanou hmotností je v případě atomu vodíku v řádu desetin promile, zatímco v případě pozitronia je 50 %.

b) Energie základního stavu pozitronia je 6,8 eV.

c) Vlnová délka fotonu vyzářeného při přechodu pozitronia z prvního excitovaného stavu do základního stavu je 243 nm.

d) Vlnová délka fotonu vyzářeného při odpovídajícím přechodu v atomu vodíku v Lymanově sérii je 122 nm, tedy poloviční oproti vlnové délce přechodu pozitronia.

