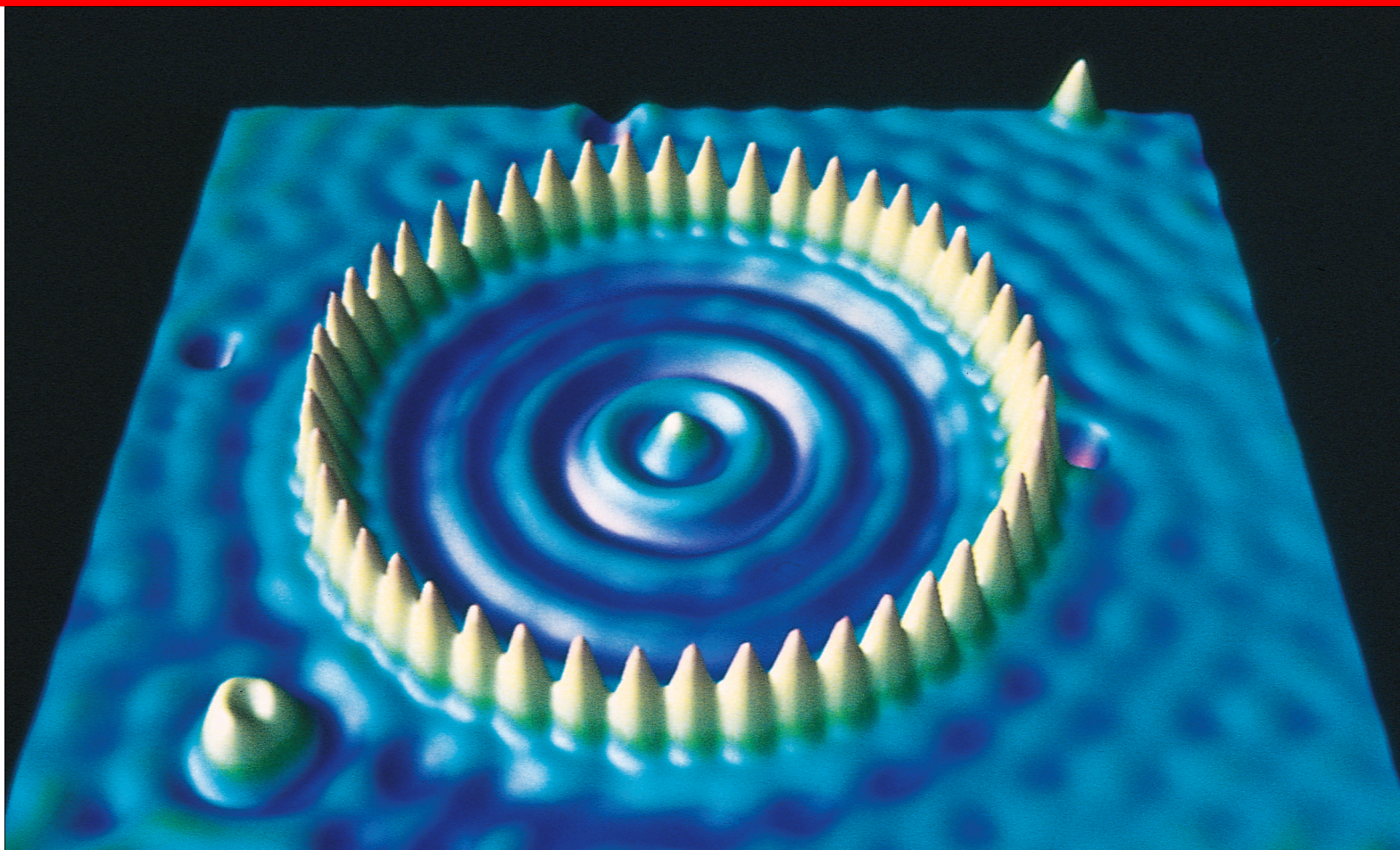


40

Více o de Broglieho vlnách



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

40.1 STAVBA ATOMU

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

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

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

40.2 VLNY NA STRUNÁCH A DE BROGLIEHO VLNY

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

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

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

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

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

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

40.3 ZACHYCENÍ ELEKTRONU

Jednorozměrné pasti

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

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

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

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

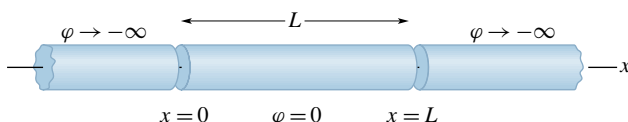
Pro každý stav struny, určený rov. (40.1), je příčná výchylka jejího elementu v různých bodech x rovna

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

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

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

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



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

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

Nalezení kvantované energie

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

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

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



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

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

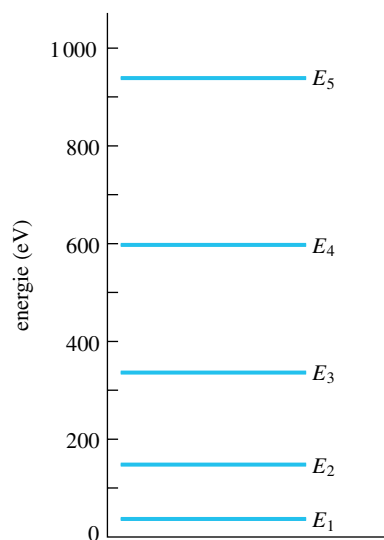
Celková energie E elektronu pohybujícího se ve středním válci, ve kterém je $E_p = 0$, je rovna jeho kinetické energii E_k . De Broglieho vlnovou délku takového elektronu můžeme tedy vyjádřit ve tvaru

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

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

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

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



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

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

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

Změny energie

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

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

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

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

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

PŘÍKLAD 40.1

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

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

ŘEŠENÍ: Z rov. (40.4) obdržíme

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{n+1} - E_n = \\ &= \frac{h^2}{8mL^2} ((n+1)^2 - n^2) = \\ &= \frac{h^2}{8mL^2} (2n+1) = \quad (40.5) \\ &= \frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{8(9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(100 \cdot 10^{-12} \text{ m})^2} (2n+1) = \\ &= (6,03 \cdot 10^{-18} \text{ J}) \frac{(1 \text{ eV})}{(1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J})} (2n+1) = \\ &= (37,7 \text{ eV})(2n+1). \quad (\text{Odpověď}) \end{aligned}$$

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

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

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

což je v souladu s obr. 40.3.

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

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

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

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

PŘÍKLAD 40.2

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

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

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

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

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

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

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

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

a po úpravě a dosazení

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

Tato vlnová délka spadá do intervalu vlnových délek rentgenového záření.

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

Nalezení vlnových funkcí

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

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

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

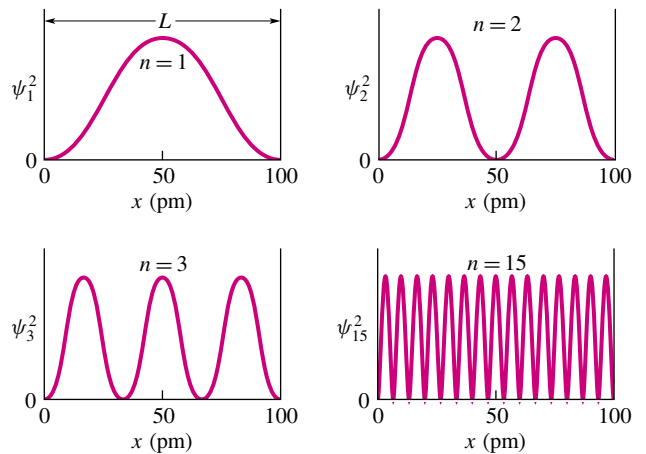
Současně nalezneme, že těmto stavům odpovídají energie dané rov. (40.4), kterou jsme odvodili na základě analogie se stojatou vlnou na napnuté struně. Vlnové funkce $\psi_n(x)$ mají stejný tvar jako funkce popisující výchylku

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

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

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

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



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

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

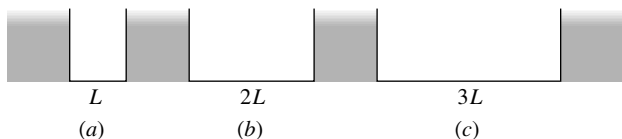
opak, elektron se téměř jistě nenachází kolem bodů $x = 0$, $x = 50 \text{ pm}$ a $x = 100 \text{ pm}$.

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

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

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

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



Normování

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

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

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

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

Energie základního stavu

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

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

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

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

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

PŘÍKLAD 40.3

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

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

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

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

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

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

odkud

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

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

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

Po integraci dostaneme

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

Dosazením za integrační meze pak obdržíme

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

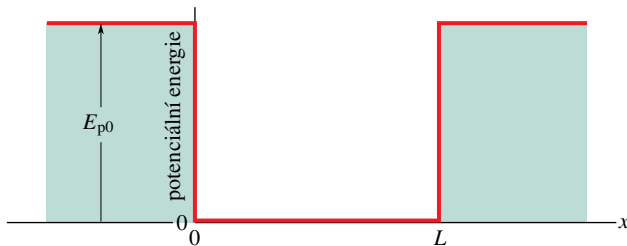
odkud

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

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

40.4 ELEKTRON V JÁMĚ KONEČNÉ HLOUBKY

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

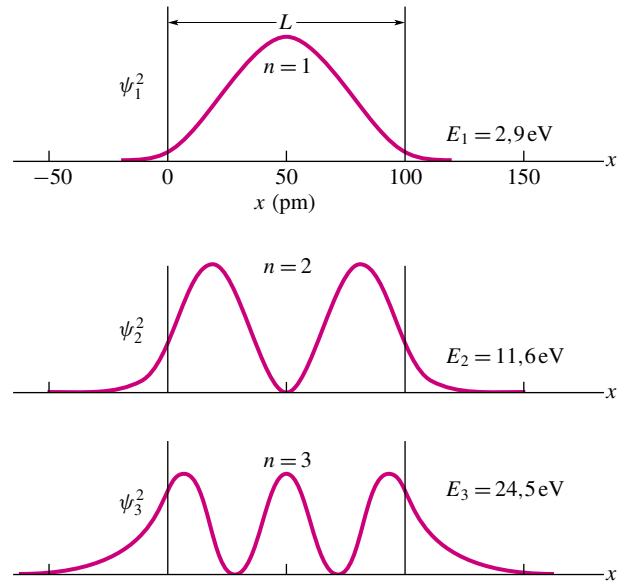


Obr. 40.5 Jáma *konečné* hloubky. Hloubka jámy je E_{p0} a její šířka je L . Podobně jako v případě nekonečně hluboké jámy na obr. 40.2 se elektron pohybuje jen podél osy x .

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

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

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



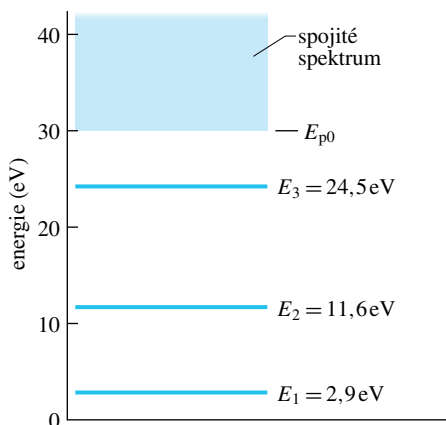
Obr. 40.6 Hustoty pravděpodobnosti $\psi_n^2(x)$ výskytu elektronu uvězněného v potenciálové jámě konečné hloubky z obr. 40.5 pro stavy s $n = 1, 2$ a 3 . Hloubka jámy je $E_{p0} = 30$ eV a její šířka je $L = 100$ pm. Jiné vázané stavy pro elektron v této jámě neexistují.

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

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

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

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



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

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

PŘÍKLAD 40.4

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

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

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

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

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

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

Tato vlnová délka se nachází v ultrafialové oblasti spektra.

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

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

Podobně jako dříve dostaneme

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

což odpovídá opět ultrafialové oblasti spektra.

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

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

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

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

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

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

odkud odvodíme

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

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

ŘEŠENÍ: Energie fotonu s touto vlnovou délkou je:

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

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

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

a jeho stav již nebude kvantovaný.

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

40.5 DALŠÍ ELEKTRONOVÉ PASTI

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

Nanokrystaly

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

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

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

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

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

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

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

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



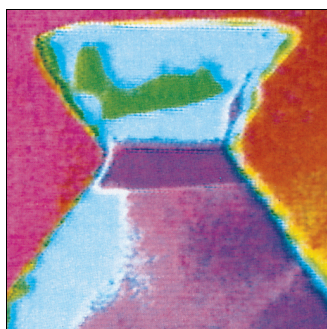
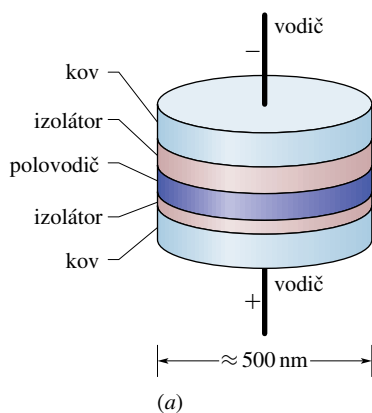
Obr. 40.8 Dva vzorky práškového polovodiče selenidu kademnatého se liší pouze velikostí zrn. Každé zrno se chová jako potenciálová jáma, ve které je vázán elektron. Horní vzorek má zrna větší, takže povolené hladiny energie jsou sobě blíže a prahová energie fotonu, který může být vázaným elektronem absorbován,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

Kvantové tečky

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

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

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



(b)

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

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

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

Kvantové hradby

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

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

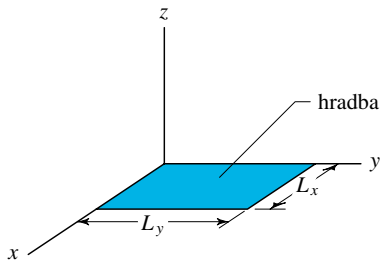
40.6 ELEKTRONOVÉ PASTI VE DVOU A TŘECH ROZMĚRECH

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

Pravoúhlá kvantová hradba

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

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



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

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

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

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

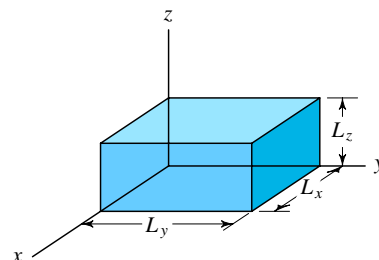
Excitace elektronu absorpcí fotonu a deexcitace elektronu emisí fotonu se řídí stejnými požadavky jako v případě jednorozměrné jámy. Jediný významný rozdíl pro dvojrozměrnou hradbu spočívá v tom, že energie daného kvantového stavu závisí na dvou kvantových číslech (n_x a n_y) místo pouze jediného (n).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

Pravoúhlá krabice

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

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

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



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

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

PŘÍKLAD 40.5

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

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

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

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

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

Tabulka 40.1 Energetické hladiny

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

^a v násobcích $h^2/(8mL^2)$

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

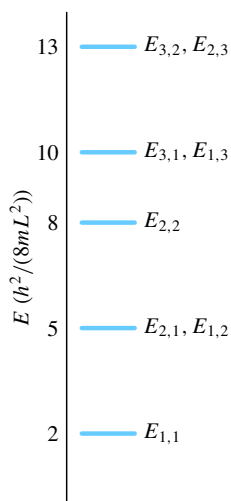
stejnou energii $5h^2/(8mL^2)$. Každá taková dvojice odpovídá degenerované energii hladině. Povšimněme si rovněž, že stavy (1, 4) a (4, 1) mají poněkud překvapivě menší energii než stav (3, 3).

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

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

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

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



Obr. 40.12 Příklad 40.5. Energiový diagram.

40.7 ATOM VODÍKU

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

Energie kvantových stavů atomu vodíku

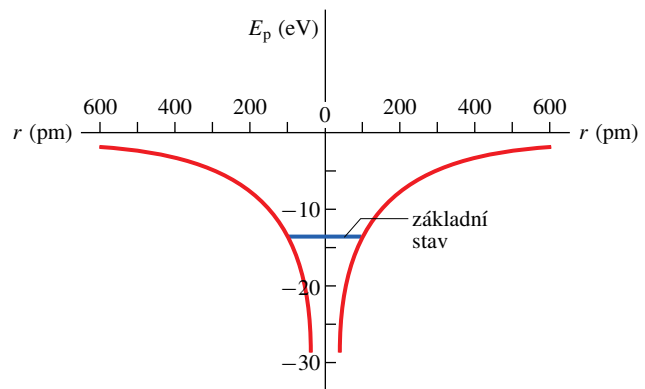
V kap. 25 jsme odvodili rov. (25.43) pro potenciální energii dvoučásticového systému, složeného ze dvou nábojů Q_1 a Q_2 :

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

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

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

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



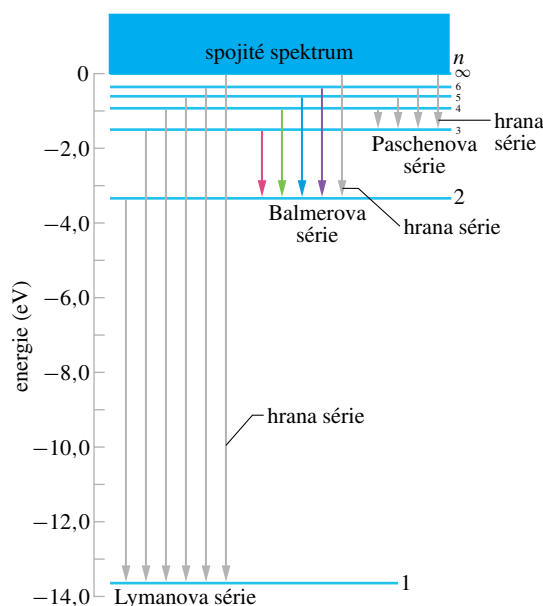
Obr. 40.13 Závislost potenciální energie E_p atomu vodíku na vzdálenosti r mezi elektronem a jádrem umístěným v počátku souřadnic. Závislost je vynesena napravo i nalevo, aby byla naznačena trojrozměrná sféricky symetrická jáma, ve které je elektron „uvězněn“.

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

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

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

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



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

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

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

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

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

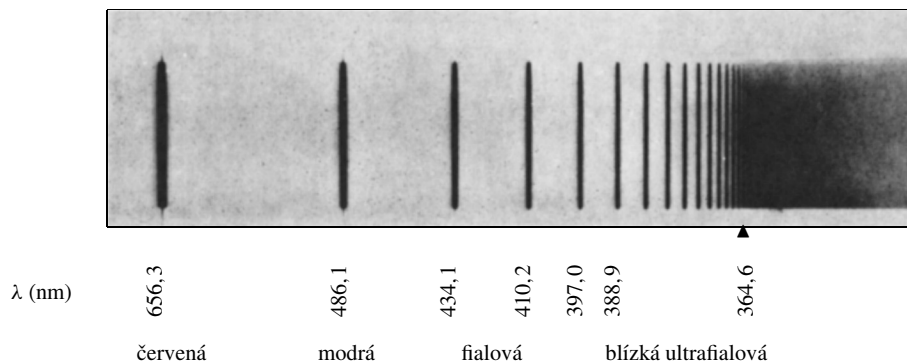
Na obr. 40.15 je spektrografem pořízené spektrum emisních čar *Balmerovy série* atomu vodíku. (Spektrální čáry jsou podobné jako v obr. 37.23 a 37.24.) Balmerova série, již určuje specifická hladina s $n = 2$, má čtyři spektrální čáry ve viditelné oblasti spektra, jak je vyznačeno na obr. 40.15 a rovněž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

Bohrova teorie atomu vodíku

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

Obr. 40.15 Spektrální čáry

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



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

Kvantová čísla atomu vodíku

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

Tabulka 40.2 Kvantová čísla atomu vodíku

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

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

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

Vlnová funkce základního stavu atomu vodíku

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

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

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

$$a = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 52,9 \text{ pm}. \quad (40.20)$$

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

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

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

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

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

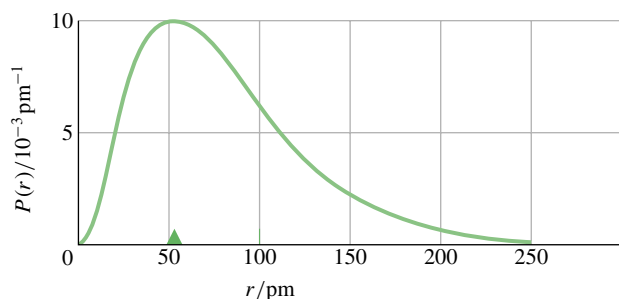
$$P(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a} \quad \begin{array}{l} \text{(radiální hustota} \\ \text{pravděpodobnosti pro} \\ \text{základní stav atomu vodíku).} \end{array} \quad (40.23)$$

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

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

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

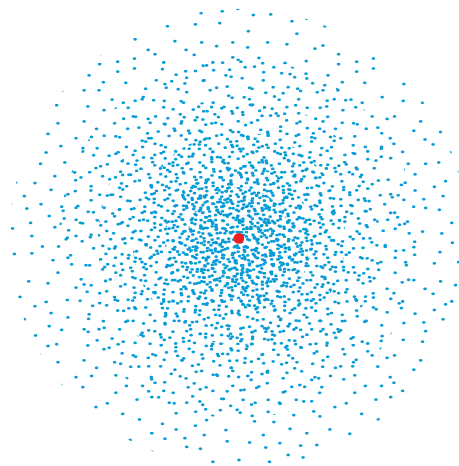
Trojúhelníková značka na vodorovné ose v obr. 40.16 je umístěna ve vzdálenosti jednoho Bohrova poloměru od počátku. Graf ukazuje, že v základním stavu atomu vodíku se elektron nachází s největší pravděpodobností ve vzdálenosti (od středu atomu) odpovídající Bohrově poloměru.



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

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

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



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

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

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

PŘÍKLAD 40.6

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

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

je odpovídající hodnota rozdílu energií rovna

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

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

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

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

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

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

(b) Jaká vlnová délka odpovídá hraně Lymanovy série?

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

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

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

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

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

PŘÍKLAD 40.7

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

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

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

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

pravidla pro derivaci součinu funkcí, dostaneme

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

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

PŘÍKLAD 40.8

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

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

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

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

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

neboli

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

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

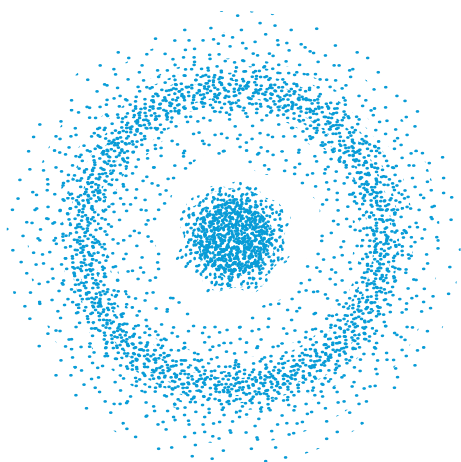
Stavy atomu vodíku s $n = 2$

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

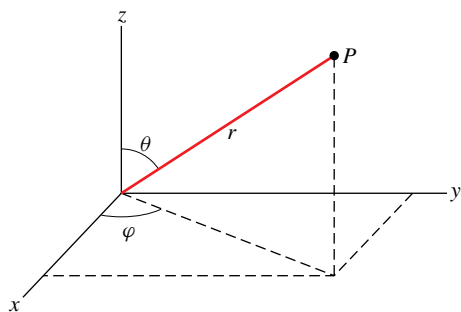
Tabulka 40.3 Kvantová čísla stavů
vodíkového atomu $s\ n = 2$

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

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



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

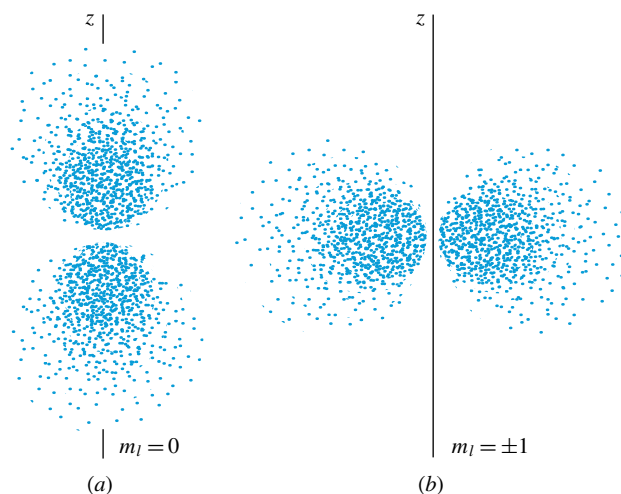


Obr. 40.19 Znárodnění vzájemného vztahu kartézských souřadnic (x, y, z) a souřadnic sférických (r, θ, φ) . Sférické souřadnice jsou obzvlášť vhodné k popisu sféricky symetrických problémů, jako je např. atom vodíku.

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

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

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



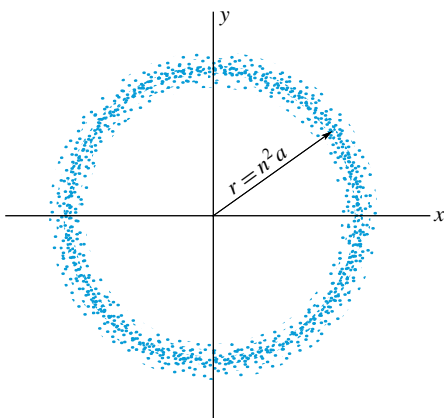
Obr. 40.20 Bodový graf hustoty pravděpodobnosti $\psi^2(r, \theta)$ atomu vodíku ve stavech $s\ n = 2$ a $l = 1$. (a) Graf pro $m_l = 0$. (b) Graf pro $m_l = +1$ a $m_l = -1$. Z obou grafů vyplývá, že hustota pravděpodobnosti je symetrická kolem osy z .

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

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

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

Abychom dokončili náš popis atomu vodíku, znázornili jsme v obr. 40.21 bodový graf hustoty pravděpodobnosti atomu vodíku s relativně vysokým hlavním kvantovým číslem ($n = 45$) a nejvyšším možným orbitálním kvantovým číslem podle tab. 40.2 ($l = n - 1 = 44$). Hustota pravděpodobnosti vytváří prstenec, který je symetrický kolem osy z a leží v těsné blízkosti roviny xy . Střední poloměr tohoto prstence je n^2a , kde a je Bohrov poloměr. Tento střední poloměr je více než 2 000krát větší než efektivní poloměr atomu vodíku v základním stavu.



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

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

40.8 PŘÍKLAD PODIVNOSTI KVANTOVÉ FYZIKY

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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

PŘEHLED & SHRUTÍ

Omezovací princip

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

Elektron v potenciálové jámě nekonečné hloubky

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

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

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

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

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

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

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

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

Normování

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

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

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

Energie základního stavu

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

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

Elektron v potenciálové jámě konečné hloubky

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

Elektronové pasti ve dvou a třech rozměrech

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

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

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

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

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

Atom vodíku

Potenciální energie atomu vodíku má tvar

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

Energie odpovídajících kvantových stavů atomu vodíku jsou

určeny řešením trojrozměrné Schrödingerovy rovnice a mají tvar

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

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

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

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

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

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

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

Podivnost kvantové fyziky

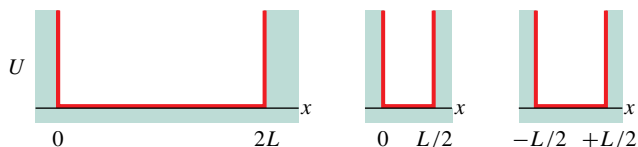
U dvojčásticového kvantového systému libovolná volba typu měření, kterou provádí první pozorovatel na jedné z částic, úplně určí výsledek měření u druhé částice. To znamená, že první pozorovatel naměří některou z možných hodnot a neví předem kterou. Druhý pozorovatel pak ani nemusí měřit — je již určeno,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

OTÁZKY

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

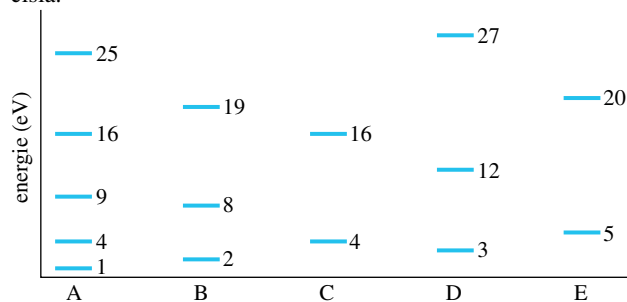
3. Budete-li chtít uvěznit v ideální pasti na obr. 40.1 namísto elektronu pozitron, musíte změnit: (a) geometrii pasti, (b) elektrický potenciál na středním válci, (c) elektrický potenciál na krajních polonekonečných válcích? (Pozitron má stejnou hmotnost jako elektron, ale má kladný náboj.)
4. Elektron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

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



Obr. 40.23 Otázka 5

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



Obr. 40.24 Otázka 6

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

CVIČENÍ & ÚLOHY

ODST. 40.3 Zachycení elektronu

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ODST. 40.4 Elektron v jámě konečné hloubky

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ODST. 40.6 Elektronové pasti ve dvou a třech rozměrech

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

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

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

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

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

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

ODST. 40.7 Atom vodíku

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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