

28. Základy kvantové fyziky

Kvantová fyzika vysvětluje fyzikální principy mikrosvěta.

- **Megasvět** – svět planet a hvězd
- **Makrosvět** – svět v našem měřítku, pozorovatelný našimi smysly bez jakéhokoli zprostředkování
- **Mikrosvět** – svět molekul, atomů a elementárních částic (elektronů, protonů, neutronů, fotonů {a dalších, např. neutrína, kvarky; antičástice – částice se stejnými vlastnostmi, ale opačným nábojem, jinými kvantovými čísly a několika dalšími veličinami}).
 - V mikrosvětě *nelze uvažovat s absolutní přesností*; nelze prohlásit: za těchto okolností se to a to určitě stane. V mikrosvětě platí – za těchto okolností se to a to stane s určitou pravděpodobností.
 - Mikrosvětlem se zabývá *molekulová fyzika, fyzika obalu a jádra atomu a kvantová fyzika*. Při určování poloh a hodnot v mikrosvětě se musí používat matematický aparát *statistiky a pravděpodobnosti*, uvažovat náhodný jev.

Základní poznatky kvantové fyziky vznikly na začátku 20. století. Německý fyzik Max Planck tehdy prováděl experimentální měření křivek záření těles a dospěl k závěru, že se jeho měření mohou dostat do souladu s teorií pouze tehdy, když bude energie záření kvantována. Na základě Planckových pozorování a teoretických odvození vystoupil Albert Einstein s hypotézou, podle které se při emisi nebo absorpci světla atomem energie nepředává spojitě, nýbrž diskrétně po malých **kvantech** energie.

Pozn.: Pro tato kvanta americký fyzikální chemik Lewis zavedl roku 1926 název **fotony**. Fotony lze považovat za **částice s nulovou klidovou hmotností pohybující se ve vakuu rychlostí světla**.

Energie fotonu je úměrná frekvenci a konstantou úměrnosti je základní konstanta kvantové fyziky, tzv.

Planckova konstanta $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}$:

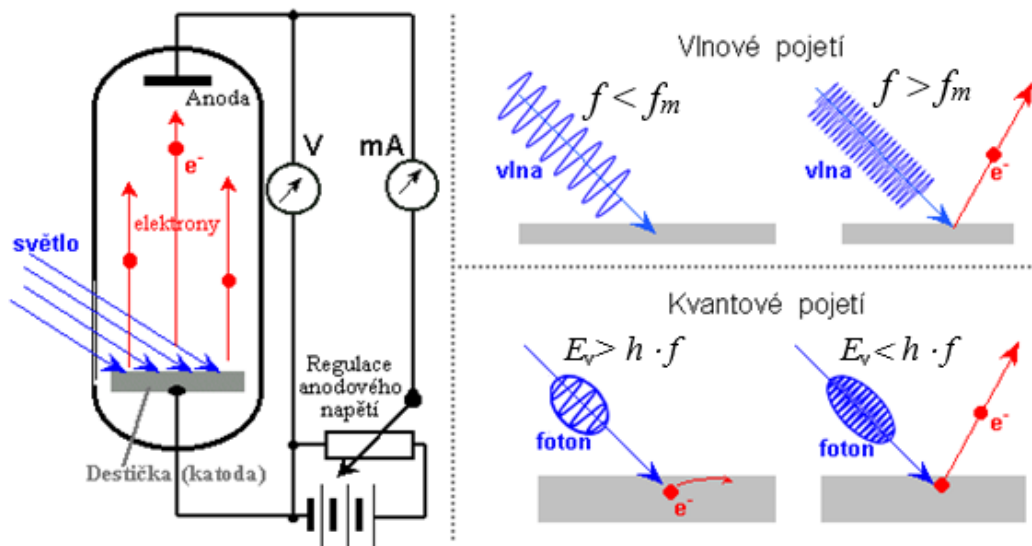
$$E = h \cdot f$$

Fotoelektrický jev

Kvantové vlastnosti záření se výrazně projevují při fotoelektrickém jevu, který pozorujeme u kovů (**vnější fotoelektrický jev**) a polovodičů (**vnitřní fotoelektrický jev**). Fotoelektrický jev byl pozorován již v 19. století, ale až na začátku 20. století byl vysvětlen Albertem Einsteinem.

Při **vnějším fotoelektrickém jevu** se působením záření uvolňují ze záporně nabitého kovu elektrony, které unikají z povrchu tělesa.

- Zinková destička (katoda) je připojena přes galvanometr k zápornému pólu zdroje. Po ozáření krátkovlnným zdrojem se z katody uvolňují elektrony, které jsou přitahovány k anodě (přitažlivý účinek anody je podporován účinkem mřížky mezi katodou a anodou) a dochází k uzavření elektrického obvodu – galvanometrem prochází malý proud (fotoproud).



Experimentálně byly zjištěny zákonitosti vnějšího fotoelektrického jevu:

1. Pro každý kov existuje **mezní frekvence** světla f_m , při níž dochází k fotoemisi. Je-li $f < f_m$, k fotoelektrickému jevu nedochází.
2. Elektrický proud (počet emitovaných elektronů) je přímo úměrný intenzitě dopadajícího záření.
3. Rychlost emitovaných elektronů (tedy i jejich kinetická energie) je přímo úměrná frekvenci dopadajícího záření, závisí na materiálu katody, ale nezávisí na intenzitě dopadajícího záření.

Pozn.: Klasická fyzika nedokázala uspokojivě vysvětlit závislost vzniku jevu na frekvenci a nezávislost energie elektronů na intenzitě dopadajícího záření.

Vysvětlení podal v roce 1905 A. Einstein (s využitím Planckovy kvantové teorie) a za teorii fotoelektrického jevu získal v roce 1921 Nobelovu cenu.

Einstein předpokládal, že elektromagnetická vlna o frekvenci f a vlnové délce λ je soubor **částic, světelných kvant** o určité energii a hybnosti. Pro tato kvanta platí:

$$E = h \cdot f; \quad p = m \cdot c = \frac{E}{c} = \frac{h \cdot f}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Planckova konstanta: $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}$

Při fotoelektrickém jevu každé kvantum záření předá svou energii pouze jednomu elektronu, který ji využije k uvolnění z kovu (výstupní práce W_v) a na zvýšení své kinetické energie.

Einsteinova rovnice fotoelektrického jevu pak má tvar:

$$h \cdot f = W_v + \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v^2 = W_v + E_k$$

Je-li $f < f_m$, nemá kvantum záření dostatečnou energii na uvolnění elektronu z kovu.

Je-li $f \geq f_m$, elektrony se ihned uvolňují a jejich počet (velikost fotoproudu) závisí na počtu dopadajících kvant, tj. na intenzitě záření.

Pozn.: Některé kovy vykazují malou výstupní práci, neboť elektrony v jejich atomech jsou slabě vázány (např. u cesia fotoefekt nastává ve viditelné oblasti ... $\lambda_m = 642 \text{ nm}$), jiné kovy mají výstupní práci větší (např. u zinku dochází k fotoefektu v ultrafialové oblasti).

Využití: - základem snímacích prvků v televizních kamerách a digitálních fotoaparátech, v kopírkách a faxech. Slouží k automatickému nastavení expozice v moderních fotoaparátech,

- Polovodičové fotovoltaické články přeměňují sluneční energii na elektrickou atd.

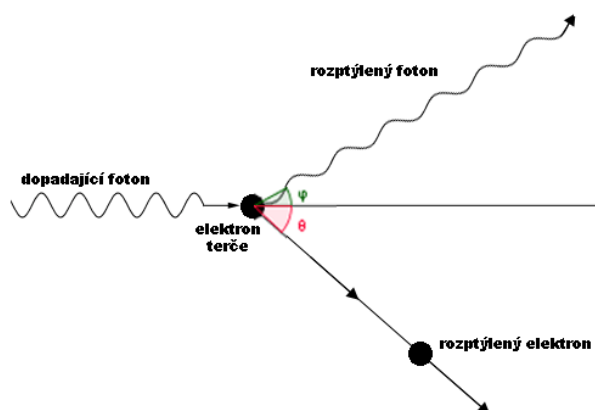
Fotorezistor – pokud není osvětlen, má velký odpor, který se po osvětlení snižuje a obvodem s fotorezistorem prochází proud úměrný intenzitě dopadajícího záření.

Fotodioda – po osvětlení snižuje svůj odpor v závěrném směru (odporové zapojení) nebo na elektrodách diody vzniká napětí a fotodioda se stává zdrojem stejnosměrného napětí (hradlové zapojení).

- reagují na světlo nebo infračervené záření v bezpečnostních systémech či v dálkovém ovládní televizorů

Comptonův jev

- jev, dokazující, že elektromagnetické záření lze považovat za tok energetických kvant, fotonů, které v sobě spojují vlnové i částicové vlastnosti.
- Provedl jej poprvé v roce 1922 Arthur Compton jako soubor pokusů s rozptylem rentgenového záření na elektronech (rentgenové záření nechal dopadat na uhlíkovou destičku).



- V rozptýleném záření našel Compton nejen záření s původní frekvencí, ale i záření s frekvencí nižší (f'), což odporovalo předpokladu klasické fyziky, že frekvence ani vlnová délka se při rozptýlu nemění.

- Pokládáme-li však foton za částici, lze rozptyl fotonu pokládat za pružnou srážku dvou částic a ze zákona zachování energie plyne: $h \cdot f = h \cdot f' + E_e'$, z čehož vyplývá, že $f' < f$, $\lambda' > \lambda$.

Vlnové vlastnosti

Interference světla (Youngův pokus)

Difrakce světla (ohyb)

Polarizace světla

Částicové vlastnosti

Fotoelektrický jev

Comptonův jev

Newton považoval světlo za proud částic (teorie částicová, korpuskulární), Huygens za vlnění světelného éteru (teorie vlnová). Odraz a lom lze vysvětlit pomocí obou teorií, ale ohyb nebo polarizace jen vlnovou teorií. Proto vlnový charakter světla dostal přednost. Zlom nastal až po vysvětlení fotoel. jevu a objevu Comptonova jevu. Tento pokus potvrdil, že *fotony se mohou chovat jako částice i jako vlnění* → **korpuskulárně vlnový dualismus**.

De Broglieova hypotéza

Francouzský fyzik de Broglie se v roce 1924 se dovolával symetrie. Jestliže je světlo vlnění, ale energii a hybnost předává hmotě v kvantech, mohly by mít naopak klasické pohybující se mikročástice (elektrony, protony, atomy i molekuly) vlnové vlastnosti.

De Broglie vyslovil domněnku, že s každou částicí o hybnosti p je spjato vlnění, které se označuje jako **de Broglieovy vlny (hmotnostní vlny)** o vlnové délce

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$

m je hmotnost částice (klidová, nebo pro rychlosti $v \rightarrow c$ relativistická), v rychlost pohybující se částice, h Planckova konstanta.

- De Broglieovy vlny byly dokázány při ohybu rychle letících elektronů na kovových krystalech už v roce 1927 (**Davissonův-Germerův pokus**), kdy byl poprvé pozorován interferenční obraz podobně jako při difrakci rentgenového záření.
 - o Elektrony jsou urychlovány napětím U a získávají kinetickou energii a rychlost:

$$E_k = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v^2 = e \cdot U \quad v = \sqrt{\frac{2 \cdot e \cdot U}{m_e}}$$

- o Vlnová délka de Broglieovy vlny je

$$\lambda = \frac{h}{m_e \cdot v} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot e \cdot m_e \cdot U}}$$

- o Teoreticky vypočítaná vlnová délka souhlasila s výsledkem experimentu. V dalších pokusech byla pozorována difrakce neutronů i celých atomů.

Stejně jako v případě elektromagnetických vln, nelze vlnové a částicové vlastnosti pohybujících se částic nikdy pozorovat současně.

Pohyb částic v mikrosvětě má náhodný, pravděpodobnostní charakter. Jestliže např. zvukové vlny jsou popsány rovnicemi newtonovské mechaniky a světelné vlny Maxwellovými rovnicemi, lze de Broglieovy vlny popsat složitými Schrödingerovými rovnicemi, jejichž řešením je **vlnová funkce** $\psi(x, y, z, t)$. Druhá mocnina této funkce $|\psi|^2$ umožňuje určit pravděpodobnost výskytu částice v daném okamžiku na daném místě.

Dualita částice a vlnění se vztahuje ke skutečnosti, že světlo lze popsat buď jako vlnu nebo jako částici, v závislosti na uspořádání experimentu a způsobu pozorování. Tato dualita se v obecnosti týká veškeré hmoty, ale nejčastěji se s ní lze setkat v případě objektů s velmi malou hmotností, zvláště pak u elementárních částic.

Heisenbergův princip neurčitosti

- princip formulovaný již v roce 1927 Wernerem Heisenbergem.
- Konstatuje, že ani nejlepšími měřicími zařízeními, které nám může poskytnout moderní technika, nemůžeme s neomezenou přesností stanovit současně polohu a hybnost sledované částice.

Platí následující meze známé pod názvem Heisenbergův princip neurčitosti:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar$$

Tedy: součin neurčitosti polohy a neurčitosti hybnosti nikdy nemůže být menší než $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Pozn. 1: Vlnové chování částic má významné technické využití. Na jeho základě byly např. zkonstruovány elektronové a iontové mikroskopy, v nichž místo světelných paprsků vystupují svazky částic (elektronů, iontů) a jejichž rozlišovací schopnost je určena délkou de Broglieovy vlny.

Pozn. 2: Kvantová mechanika se zabývá mechanickým pohybem částic v mikrosvětě. Na rozdíl od klasické mechaniky musí ovšem brát v úvahu vlnový a pravděpodobnostní charakter pohybu částic. Přesto však mezi oběma existuje souvislost, a pokud budeme přecházet od částic k makroskopickým tělesům, budou se vlnové délky de Broglieových vln jevit nekonečně malé a zákony kvantové mechaniky přejdou v zákony mechaniky klasické (podobně jako vztahy a zákony relativistické fyziky přecházejí v zákony klasické fyziky, jsou-li rychlosti částic a těles mnohem menší než je rychlost světla ve vakuu).

Atomová fyzika

Atomová fyzika se zabývá vlastnostmi a pohybem elektronů v elektronovém obalu atomu (jádro přitom zůstává neměnné). Naproti tomu *jaderná fyzika* zkoumá pohyb uvnitř atomových jader a jejich přeměny.

Modely atomu

Myšlenku, že se všechna tělesa skládají z částic (atomů), vyslovili již v 5. století př. n. l. řečtí filosofové Démokritos z Abdéru, Leukippos z Milétu a Epikúros ze Sámu. Byla to ovšem pouze geniální domněnka, kterou neuměli dokázat.

Vývoj názorů na stavbu atomu

Vývoj modelu atomu byl inspirován snahou o vysvětlení čárového charakteru emisních spekter plynů, viz Druhy spekter.

1. Pudinkový model (1897): Joseph John Thomson – atom je spojitě naplněn kladnou hmotou, v ní jsou záporné elektrony (Thomson na přelomu 19. a 20. století vyslovil na základě Edisonových a vlastních experimentů hypotézu o existenci elektronu a jeho záporném náboji, kterou v roce 1910 potvrdil experimentálně Robert Andrews Millikan).

2. Planetární model (1911): Ernest Rutherford – výsledky jeho známého pokusu s rozptylem záření α na tenké kovové fólii vedly Rutherforda k představě, že v jádře je téměř veškerá hmotnost atomu, elektrony obíhají kolem jádra jako planety.

- Jádro $d \approx 10^{-15}$ m, atom $d \approx 10^{-10}$ m.

- Rutherford navíc vyslovil předpoklad, že kromě kladných částic (protonů) existují v jádře atomu i elektricky neutrální částice. To v roce 1932 potvrdil objevem neutronů James Chadwick – za svůj objev dostal v roce 1935 Nobelovu cenu.

- Ukázalo se ovšem, že Rutherfordův model atomu byl v rozporu se zákony klasické fyziky, podle nichž pohybující se elektron vysílá elektromagnetické záření na úkor své kinetické energie, přibližoval by se k jádru, nakonec by s ním splynul a atom by zanikl.

3. Bohrov model (1913): Tento zásadní nedostatek se pokusil odstranit dánský fyzik Niels Bohr formulací svých dvou postulátů:

1. Elektron se může pohybovat kolem jádra jen po určitých dráhách – orbitech - a přitom nevyzařuje energii.

Pozn.: Pro předpokládanou kruhovou dráhu elektronu vypočítal oběžnou rychlost elektronu:

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{m_e v} \Rightarrow v = \frac{n \cdot h}{2 \cdot \pi \cdot r \cdot m_e}, \quad (h - \text{Planckova konstanta, } n - \text{kvantové číslo})$$

a s použitím Coulombova zákona určil poloměr kruhové dráhy elektronu:

$$F_e = F_d \Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} = m_e \frac{v^2}{r}, \quad \text{po dosazení: } r = \frac{\epsilon_0 \cdot h^2}{m_e \cdot \pi \cdot e^2} \cdot n^2.$$

2. Elektron vyzařuje nebo přijímá energii pouze při přechodu z jednoho stacionárního stavu do druhého, energeticky odlišného (při přeskoku z jedné energetické hladiny na druhou):

$$E = E_1 - E_2 = h.f.$$

Energie atomu je tedy kvantována a *Bohrův model* byl **první kvantový model atomu**.

4. Kvantově mechanický model (1925): Erwin Schrödinger, Paul Dirac – atomy se mohou nacházet pouze v určitých stacionárních stavech. Stacionární stavy jsou popsány **vlnovou funkcí** $\psi(x, y, z, t)$ a **hustotou pravděpodobnosti** $|\psi|^2$, která určuje, s jakou pravděpodobností bude v daném okamžiku elektron na daném místě.

Důsledkem trojrozměrnosti vlnové funkce je stav elektronu v atomu popsán kvantovými čísly:

- 1) **Hlavní kvantové číslo:** $n \in \{1, 2, \dots\}$ – kvantuje energii atomu a souvisí s velikostí orbitalu.
- 2) **Vedlejší (orbitální) kvantové číslo:** $l \in \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$ – také kvantuje energii a určuje tvar orbitalu. Ve spektrometrii je označováno písmenem (*s, p, d, f, g, ...*).
- 3) **Magnetické kvantové číslo:** $m \in \{-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l\}$ – určuje orientaci orbitalu v prostoru, počet hodnot udává počet příslušných orbitalů.
- 4) **Spinové kvantové číslo:** $s = \pm \frac{1}{2}$ – charakterizuje magnetický moment elektronu.

Pauliho vylučovací princip

V atomu nemohou být dva elektrony, jejichž všechna čtyři kvantová čísla by byla stejná.

Pozn.: Dnes víme, že se Pauliho princip vztahuje na fermiony – částice, k nimž patří např. elektron, proton i neutron. Existují však částice, pro něž Pauliho princip neplatí – *bosony* (např. foton)

Kvantově mechanický model umožnil vysvětlit čarová spektra látek (viz dále), chemickou vazbu, periodickou tabulku, teorii pevných a kapalných látek. Pomocí kvantového modelu si vysvětlíme elektronový obal atomu a výstavbu periodické tabulky.

Periodická soustava

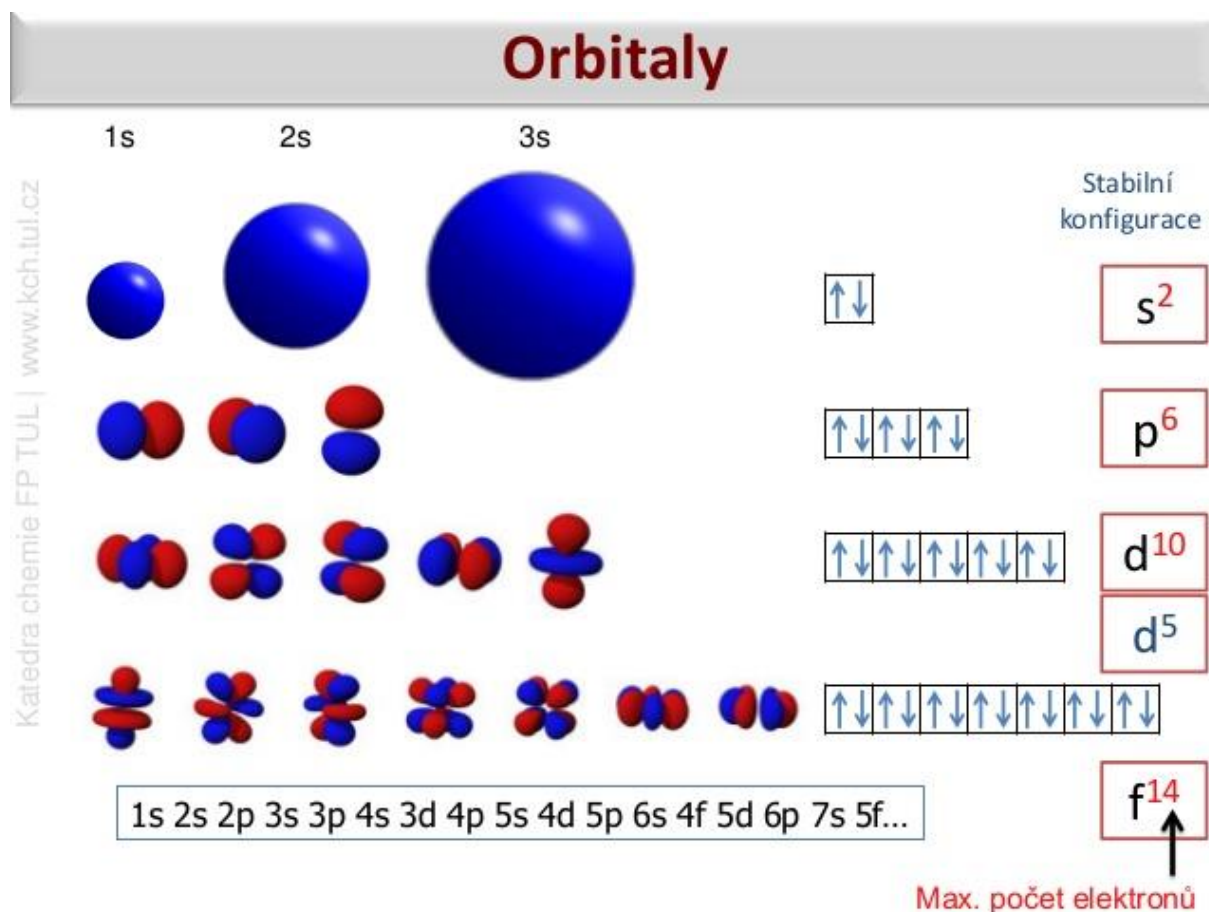
Stavy s hlavním kvantovým číslem 1..5 označujeme jako slupky *K, L, M, N, O*.

V každé slupce rozlišujeme podslupky *s, p, d, f, g*. Slupky s nižšími kvantovými čísly nazýváme vnitřní, poslední (vnější) slupka je **valenční** – rozhoduje o chemických vlastnostech prvku.

Slupka	<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	druh orbitalu	počet orbitalů	počet elektronů ve slupce
<i>K</i>	1	0	0	1 <i>s</i>	1	2
<i>L</i>	2	0	0	2 <i>s</i>	1	8
		1	-1,0,1	2 <i>p</i>	3	
<i>M</i>	3	0	0	3 <i>s</i>	1	18
		1	-1,0,1	3 <i>p</i>	3	
		2	-2,-1,0,1,2	3 <i>d</i>	5	
<i>N</i>	4	0	0	4 <i>s</i>	1	32
		1	-1,0,1	4 <i>p</i>	3	
		2	-2,-1,0,1,2	4 <i>d</i>	5	
		3	-3,-2,-1,0,1,2,3	4 <i>f</i>	7	

Pravidla pro výstavbu elektronového obalu

- Orbital je oblast v prostoru, kde je největší pravděpodobnost výskytu elektronu.
- **Výstavbový princip** (empirické pravidlo, z něhož existují výjimky): *Nejdříve se zaplňují orbitály s nejnižší energií.*



Druhy spekter

K poznání stavby elektronového obalu atomu velmi napomáhá spektroskopie. Příčinou vzhledu spektra jsou přechody elektronů mezi různými energetickými hladinami v atomovém obalu.

Druhy spekter podle vzhledu:

Čárové: atomy zářících plynů a par prvků – charakteristické pro daný prvek tak jako otisk prstu pro každého člověka. Podle spektra lze každý prvek jednoznačně identifikovat (spektrální analýza).

Pásově: páry sloučenin – je tvořeno barevnými pásy velkého množství spektrálních čar ležících v těsné blízkosti, tyto skupiny jsou pak od sebe odděleny tmavými pásy.

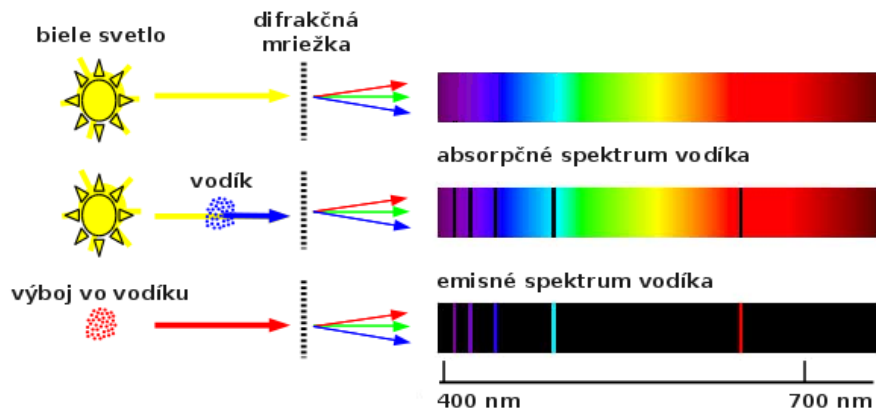
Spojité: žhnoucí látky pevné nebo kapalné – např. Slunce (ale i jiná zahřátá tělesa) vysílá elmg. záření všech vlnových délek a má spojité spektrum

Druhy spekter podle způsobu vzniku:

Emisní: (emitto = vysílám) spektrum vyzařované látkou

Absorpční: (absorbeo = pohlcuji) vzniká průchodem polychromatického světla látkou, v níž je světlo některých vlnových délek pohlceno – látka pohlcuje stejné frekvence, jako sama vyzařuje

Příklad: spojité záření, které vzniká uvnitř Slunce (hvězdy), prochází jeho chromosférou a atmosférou Země a v nich je záření určitých vlnových délek pohlcováno. Na pozadí spojitěho spektra Slunce (hvězdy) se pak objevuje soustava tmavých absorpčních čar (Fraunhoferovy čáry). Podle nich je možno určovat chemické složení sluneční nebo hvězdné atmosféry. Tímto způsobem byl např. objeven prvek helium dříve na Slunci než na Zemi.



- Nyní se zaměříme na spektrum nejjednoduššího prvku, u ostatních prvků vznikají spektra analogicky.

Spektrum vodíku

Spektrum vodíku je možné vysvětlit, pokud budeme předpokládat, že atom vodíku se může nacházet na určitých energetických hladinách E_n a při přechodech (skocích) z vyšší energetické hladiny (n) na nižší (m) vyzařuje elektromagnetické záření podle vztahu

