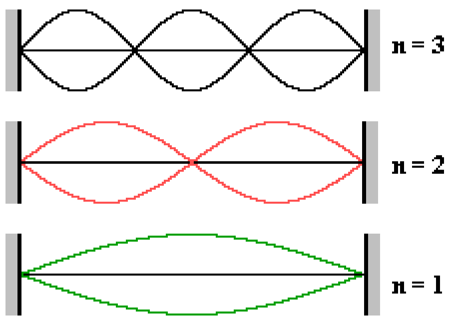
ZÁKLADY KVANTOVÉ MECHANIKY

De Broglieho hypotéza: Uvažujme volnou částici, která se bude pohybovat podél osy *x* podle Newtonova zákona setrvačnosti rovnoměrným přímočarým pohybem. Podle de Broglieovy hypotézy na ní můžeme pohlížet jako na nekonečnou rovinnou vlnu. Částici nyní uzavřeme mezi dvěma rovnoběžnými, nekonečně vysokými stěnami kolmými k ose *x* a vzdálenými o délku *L*, od nichž se může částice pružně odrážet. Stěny musí být „nekonečně vysoké“, jinak by se částice „protunelovala“ ven. Říkáme, že částice se nachází uvnitř nekonečně hluboké potenciálové jámě a její pohyb je vázán na úsečku.

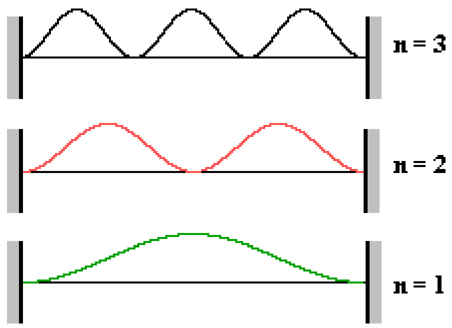
Z hlediska klasické fyziky může mít taková částice libovolnou rychlost a energii. Při pružných odrazech se její energie nebude měnit a částice se bude pohybovat rychlostí o téže velikosti střídavě oběma směry. „Pravděpodobnost výskytu“ této klasické částice bude stejná ve všech bodech úsečky.

Z hlediska vlnového charakteru částic bude situace jiná. Po odrazech na stěnách dojde díky skládání odraženého a přímého vlnění ke vzniku stojatého vlnění (naprosto analogicky jako na napjaté struně). Struna ale nemůže kmitat jakkoliv, ale jen tak, aby se po celé délce struny rozložil celočíselný počet půlvln. Musí tedy platit: $L = n\frac{\lambda}{2};\, n \in N \Rightarrow \lambda_n = \frac{2L}{n}$. Struna se tedy nachází v kmitavých stavech, které jsou charakterizovány určitou frekvencí a rozložením kmiten a uzlů podél struny (viz obr. 1).



obr. 1

Budeme-li nyní uvažovat částici, která se bude chovat podle de Broglieovy hypotézy, pak se bude chovat spíše jako vlna. Tato hypotéza ale musí být potvrzena experimentem. Elektron vázaný na úsečku se bude nacházet jen v určitých stavech charakterizovaných celými čísly *n*. V každém takovém stavu bude mít zcela určitou energii E_n a jeho pohyb bude popsán vlnovou funkcí ψ_n s příslušným rozložením pravděpodobnosti výskytu podél úsečky. Toto rozložení hustoty pravděpodobnosti $|\psi_n|^2$ je znázorněno na obr. 2.



obr. 2

Určit energii E_n a pravděpodobnosti výskytu částice je možné pouze řešením příslušné kvantově mechanické rovnice. Ukazuje se ale, že správné hodnoty energie je možné dostat i tehdy, použijeme-li výraz pro de Broglieho vlnovou délku $\lambda = \frac{h}{mv}$ platnou pro volně se pohybující částici. Energie částice pak bude $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$. Dosazením do tohoto vztahu dostaneme pro možné hodnoty energie $E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$.

Vlnové chování částice, která se pohybuje v určité omezené oblasti prostoru, vede tedy ke **kvantování energie**. Částice se může nacházet pouze na určitých **energetických hladinách** určených **kvantovým číslem** *n*. V **základním stavu** pro $n = 1$ je energie částice, jejíž pohyb je vázán na úsečku délky *L*, rovna $E = \frac{h^2}{8mL^2}$. S rostoucím *n* se pak energetické hladiny od sebe vzdalují. Vyšší stavy než základní stav se nazývají **vzbuzené (excitované) stavy**.

Na rozdíl od pohybu klasické kuličky (např. pingpongového míčku, …) budou na úsečce místa, kde bude výskyt částice nejpravděpodobnější, kde se bude „zdržovat nejvíce“. Tato místa odpovídají poloze kmiten chvějící se struny. Naproti tomu v místech, která odpovídají uzlům bude pravděpodobnost výskytu částice nulová.

Důležité je, že uvedený obrázek rozložení pravděpodobnosti výskytu částice se během času nemění, tj. je **stacionární** (analogicky jako rozložení kmiten a uzlů na struně). Navíc v tomto stavu částice neztrácí energii - zůstává na své energetické hladině. V makrosvětě, jak víme, je každý pohyb vždy postupně utlumen třením a odporem prostředí, a tedy rozkmitaná struna brzy dozní.

Částice mikrosvěta může ztrácet nebo získávat energii pouze tak, že přejde skokem z jednoho kvantového stavu do druhého. Při přechodu z vyššího stavu do nižšího se energii vyzáří (např. v podobě fotonu), pře opačném přechodu částice energii pohltí. Energie se může předávat i jiným způsobem než zářením - např. srážkou částic, … ale vždy pouze v kvantech odpovídajících rozdílu energetických hladin.

Schrodingerova rovnice: Kvantová mechanika zkoumá obecný pohyb částic v prostoru pod vlivem různých sil (Coulombovských sil elektrického přitahování, jaderných sil, …) tím, že řeší vlnovou tzv. **Schrödingerovu rovnici**. Z ní je možné určit vlnové funkce a pravděpodobnosti výskytu částice v prostoru. Tato rovnice má řešení právě jen pro určité hodnoty energie (energetické hladiny), které odpovídají **kvantovým stacionárním stavům**. Pokud je částice v tomto stavu, nijak se navenek neprojevuje. Teprve při přechodech mezi stacionárními stavy vydává nebo přijímá energii.

Budeme-li zvětšovat délku úsečky *L*, po níž se částice pohybuje mezi dvěma rovnoběžnými nekonečně vysokými stěnami kolmými k ose *x*, energie daného stavu bude klesat v souladu se vztahem $E_n = \frac{\hbar^2}{8mL^2}n^2$ a rozdíly mezi sousedními energetickými hladinami se budou zmenšovat. Pro nekonečné L bude již částice volná a její energie přestane být kvantová. Naopak bude-li se délka *L* zmenšovat, tj. budeme-li se snažit částici sevřít stěnami na stále kratší vzdálenosti, energie částice poroste. To je v souladu s tím, co víme o energii atomů, atomových jader a částic.

Moment hybnosti: K nejdůležitějším zákonům fyziky patří zákony zachování energie, hybnosti a momentu hybnosti. Izolované těleso se samo od sebe nedá do pohybu, neboť by se tím změnila jeho hybnost, ani se nezačne otáčet, neboť tím by se změnil jeho moment hybnosti. Všechny tyto zákony přesně platí nejen v klasické, ale i v kvantové mechanice.

Hybnost atomu v klidu je ovšem nulová, a zachovávající se veličiny, které určují jeho vnitřní stav, jsou proto jen jeho energie a moment hybnosti. Základní vlastnost momentu hybnosti v kvantové mechanice je, že smí nabývat jen hodnot, které jsou celočíselnými násobky Planckovy konstanty $\hbar$, objevil již Bohr. První(byť neúplné) vysvětlení takového „kvantování" podal de Broglie o deset let později; předpokládal, že spolu s elektronem obíhají jádro v atomu „vlny hmoty" a atom může být stabilní jen tehdy, když toto vlnění má na uzavřené dráze elektronu celistvý počet l vlnových délek, takový atom má moment hybnosti $l\hbar$. Moderní kvantová teorie, která vznikla krátce nato, tento předpoklad po určitých úpravách potvrdila.

Jak víme, ne každá vlnová funkce ψ odpovídá stavu, v němž má částice určitou hybnost např. ve směru osy x, tedy p_x. Pouze když je závislost ψ na x sinusová, nalezneme při při každém měření hybnosti částice hodnotu $p_x = \hbar k_x$. K_x je počet vlnových délek, které se vejdou na vzdálenost 2π. Není-li závislost ψ na x sinusová, nalezneme při měření různé hodnoty hybnosti p_x, každou z nich s určitou pravděpodobností.

Při přechodu od hybnosti k momentu hybnosti musíme „postup" v určitém směru nahradit „obcházením" okolo určité osy. V kvantové mechanice je ustálenou tradicí nazývat osu, vzhledem k níž moment měříme, „osou z". Abychom mohli sledovat, jak se mění vlnová funkce ψ „okolo" osy z, vyjádříme ji jako funkci válcovitých nebo sférických souřadnic; jednou z nich je úhlová souřadnice φ, která hraje pro moment hybnosti M_z (vzhledem k ose z) stejnou roli jako třeba „délková" souřadnice x pro hybnost p_x. Závisí-li $\psi(\varphi)$ na φ sinusově, pak při měření najdeme určitou hodnotu momentu hybnosti, $M_z = l_z\hbar$. Není-li závislost ψ na φ sinusová, pak najdeme různé hodnoty momentu, každou z nich s určitou pravděpodobností.

Základní rozdíl mezi hybností a momentem hybnosti je v tom, že při postupu „podél osy x" se nikdy nevracíme do téhož místa, ale při změně úhlu φ o2π se do téhož místa vracíme. Proto$\psi(\varphi)$ musí nabývat stejné hodnoty při φ i při $\varphi + 2\pi$ a to je možné jen když l_z je celé číslo. Tím je vlastně vyjádřeno de Broglieovo tvrzení, že okolo osy z se musí vejít celistvý počet vlnových délek.

Spin: Roku 1925 R. Kroning spolu s dalšími dvěma fyziky vyslovily domněnku, že elektron nejen „obíhá kolem jádra“, ale také se „otáčí kolem své osy“, a že díky tomuto „otáčení“, které nazvali **spin**, má moment hybnosti $\frac{1}{2}\hbar$.

Mechanická analogie mezi spinem a „rotací“ elektronu kolem své osy je sice asi jediný způsob, jak si spin názorně představit, ale jinak je stejně nepřesná, jako když si orbitální pohyb elektronu představujeme jako „obíhaní“ bodové částice okolo jádra.

Spin je kvantový a jeho existence přirozeně vyplývá teprve z relativistické kvantové teorie. Pro velikost spinového momentu hybnosti S platí vztah: $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$, kde však hodnota spinového kvantového čísla s může nabýt jen jediné hodnoty s = 1/2. Složka spinového momentu do zvoleného směru (osy z) může nabýt pouze dvou hodnot $S_z = m_s\hbar$, $m_s = \pm\frac{1}{2}$.

Spin elektronu můžeme považovat za jednu z jeho základních charakteristik, podobně jako jeho elektrický náboj, klidovou hmotnost apod. Různé částice mají různé hodnoty spinu. Teprve s uvážením spinu je popis stavu elektronu v atomu úplný.

Použitá literatura: Encyklopedie Fyziky – Martin Macháček.

Vydala: Mladá fronta 1995

ČVUT Fyzika II – Doc. RNDr.Josef Jelen, Csc.

Vydalo: Vydavatelství ČVUT, Zikova 4, 16635 Praha, v září 1998
Vytisklo: Ediční středisko ČVUT, Zikova 4, Praha

Internet – http://www.panska.cz/reichl/fyzika/kv_mech/kv_mech.htm

http://cheminfo.chemi.muni.cz/ianua/Barbora/orbitaly.html