

## I. POČÁTKY KVANTOVÉ FYZIKY

### 1. Některé "neřešitelné" problémy klasické fyziky

Experimentální kořeny kvantové fyziky sahají hluboko do XIX. století. Studium rentgenových paprsků, radioaktivity, katodových paprsků, optických spekter, tepelného záření, fotoefektu a řady dalších jevů, je možné plným právem považovat za zdroje kvantové teorie. Tato skutečnost se ovšem stávala zřejmou postupně, mnohdy až souběžně s rozvojem vlastní kvantové mechaniky. Ohromné úspěchy kterých dosáhla klasická fyzika - mechanika, elektrodynamika, elektromagnetická teorie světla, termodynamika a statistická fyzika - vedly na přelomu XIX. a XX. století k přesvědčení, že fyzikální obraz světa je téměř dokončen. Existovaly pravda i jevy, které se stále nedařilo objasnit, ale mezi fyziky převládalo přesvědčení, že je jen otázkou času, kdy tyto "obláčky na zářivě modrém nebi fyziky" zmizí. Dnes, při pohledu zpět, vidíme, že právě v nich byl zárodek zcela nového pohledu na svět.

Na cestě k současné kvantové teorii lze vystopovat dvě základní křivolaké linie, které se přibližovaly, vzdalovaly a jak dnes vidíme, někdy i protínaly, až se konečně spojily v jediné teorii - kvantové mechanice. První z nich je spojena především s řešením úloh teorie záření. Kvantovou se stala díky pracím Maxe Plancka (1900) a Alberta Einsteina (1905). Fyzika jí vděčí např. za zavedení pojmů kvantum energie, foton, indukované záření, za vytvoření spojnice mezi intenzitou spektrálních čar a pravděpodobností kvantových přechodů a za vyjasnění korpuskulárně-vlnového charakteru světla. Podél druhé linie se řešily hlavně problémy stavby atomů a optických spekter. Do kvantové oblasti vešla až v roce 1913 pracemi Nielse Bohra. Přinesla s sebou představy o kvantových stavech a přechodech mezi nimi, kvantová čísla, výběrová pravidla atd. V následujících odstavcích se jen krátce zmíníme o některých problémech, jejichž řešení mělo pro budování kvantové teorie klíčový význam.

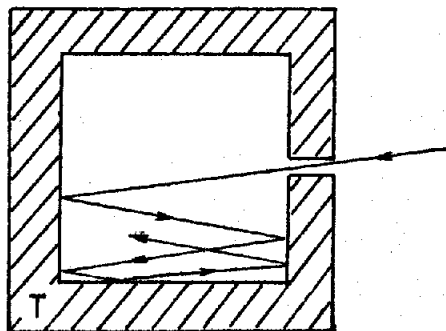
#### 1.1) Záření černého tělesa a Planckova konstanta

Z každodenní zkušenosti víme, že těleso zahřáté nad asi  $700^{\circ}\text{C}$  vyzařuje viditelné světlo (přístroje prokáží emisi elektromagnetického záření i v neviditelných částech spektra a při libovolné teplotě); jeho barva s růstem teploty přechází od temné rudé až k bílé. Pochopit proces emise bylo možné již koncem minulého století, neboť se vědělo, že v látce jsou kladné i záporné elektrické náboje a z Maxwellovy elektrodynamiky vyplývalo, že elektrický náboj, který se pohybuje se zrychlením (tj. jinak než rovnoměrně přímočaře), vyzařuje elektromagnetické vlnění. Elektrické náboje, které v pevné látce vykonávají na úkor tepelné energie kmitavý pohyb, musí proto vyzařovat elektromagnetické vlnění všech možných

vlnových délek a jeho intenzita přitom poroste při zvyšování teploty. Existuje ovšem i proces obrácený: látka absorbuje elektromagnetické vlnění které na ni dopadá; elektrické náboje přitom zvětšují v poli dopadajícího vlnění svoji amplitudu, což se projeví zvýšením teploty tělesa. Hypotetické těleso, které by bylo schopno absorbovat veškeré elektromagnetické vlnění dopadající na jeho povrch, se nazývá černé těleso. Reálná tělesa tuto podmínku nikdy nesplňují.

Na základě pouze termodynamických zákonů (bez ohledu na mechanismus emise a absorpce) dokázal již r.1859 G.R.Kirchhoff, že pro libovolnou vlnovou délku a danou teplotu je poměr energie emitované reálným povrchem k energii, kterou by za týchž podmínek emitoval povrch černého tělesa, roven koeficientu absorpce dané látky. Černé těleso lze tedy považovat za standardní zářič, jehož vyzařovací charakteristika, tj. závislost intenzity emitovaného záření na vlnové délce, je určována pouze jeho teplotou. Určíme-li tedy spektrální závislost záření černého tělesa jako funkci teploty, potom budeme znát i emisní závislosti pro všechna tělesa u nichž je stanovena závislost koeficientu absorpce na vlnové délce a teplotě. To byl také důvod, proč záření černého tělesa bylo koncem XIX. století intenzivně studováno, jak experimentálně tak i teoreticky.

Pro experimentální studie se černé těleso realizuje na základě věty dokázané r. 1860 rovněž Kirchhoffem; podle ní je záření černého tělesa ekvivalentní záření, které vychází malým otvorem z velké dutiny v tělese udržovaném na teplotě  $T$  (obr.1). Že tomu tak je, pochopíme



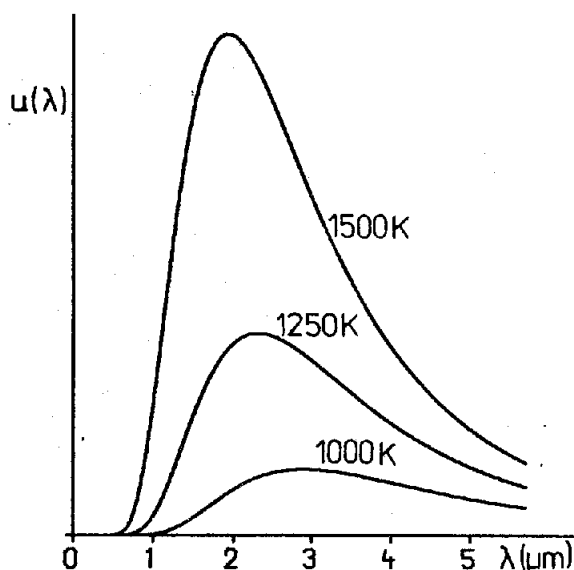
Obr. 1

snáze z obráceného procesu. Záření vstupující zvnějšku otvorem do dutiny se po mnoha odrazech uvnitř prakticky zcela pohltí i když stěny dutiny nevykazují stoprocentní absorpci; vnějšímu pozorovateli se pak ploška otvoru bude jevit jako černé těleso a aproximace bude tím lepší, čím menší bude otvor vzhledem k rozměrům dutiny.

Pro závislosti spektrální hustoty zářivé energie  $u(\lambda)$  na vlnové délce (obr.2) je typický: (a) prudký spád k nule v oblasti krátkých vlnových délek, (b) po-

sun polohy maxima  $\lambda_{\max}$  s rostoucí teplotou ke kratším vlnovým délkám (platí tzv. Wienův zákon :  $\lambda_{\max} T = \text{const}$  ).

Klasické řešení, vycházející z Maxwellovy elektrodynamiky a Boltzmannovy statistické termodynamiky, dávalo evidentně nesprávný výsledek:  $u(\lambda)$  směrem ke kratším vlnovým délkám bez omezení rostlo. Proč tomu tak bylo, pochopíme snadno. Řešení Maxwellových rovnic pro elektromagnetické pole v dutině černého tělesa ukáže, že zde mohou existovat stojaté vlny s libovolně krátkou vlnovou délkou. Podle závěrů Boltzmannovy



Obr. 2

Závislost spektrální hustoty zářivé energie v dutině černého tělesa na vlnové délce pro tři různé teploty.

$$\lambda_{\max}(1000 \text{ K}) = 2,90 \text{ } \mu\text{m}$$

$$\lambda_{\max}(1250 \text{ K}) = 2,32 \text{ } \mu\text{m}$$

$$\lambda_{\max}(1500 \text{ K}) = 1,93 \text{ } \mu\text{m}$$

statistické termodynamiky se celková energie záření v dutině (která je pochopitelně konečná) musí rovnoměrně rozdělit mezi všechny stojaté vlny (kterých je nekonečně mnoho); máme tedy konečnou energii rozdělit na nekonečný počet stejných dílů. Avšak i když tuto obtíž pomineme, je zřejmé, že funkce  $u(\lambda)$  by musela růst pro  $\lambda \rightarrow 0$ , neboť i počet možných stojatých vln, připadajících na jednotkový interval vlnových délek, prudce roste pro  $\lambda \rightarrow 0$ .

Všechny pokusy pochopit tento paradoxní výsledek byly neúspěšné, dokud Max Planck v r. 1900 nepřišel s hypotézou, že oscilátor s vlastní frekvencí  $\nu$  může emitovat a absorbovat energii pouze po kvantech

$$E = h\nu \quad (1a)$$

kde  $h$  představuje novou fundamentální přírodní konstantu, které se později začalo říkat Planckova konstanta.

K dosažení shody s experimentálně zjištěnými závislostmi  $u(\lambda)$  musel Planck položit  $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{Hz}^{-1}$ . Protože se ve fyzice častěji užívá kruhová frekvence  $\omega = 2\pi\nu$ , zapisuje se vztah (1a) dnes obvykle

$$E = \hbar\omega \quad (1b)$$

kde  $\hbar = h / 2\pi$ .

Dnešní hodnota Planckovy konstanty je

$$h = 6,626176 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{Hz}^{-1} ; \quad \hbar = 1,0545887 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

Uvědomme si, že vztah (1) neměl precedent. Jestliže energie oscilátorů (kmitajících nábojů) ve stěnách dutiny se mění podle (1), potom i energie emitované vlny se mění po skocích  $h\nu = hc/\lambda$  ( $c$  je rychlost světla). V klasické fyzice je však energie vlny určována její amplitudou, naprosto nezávislou na vlnové délce. Přijmeme-li však relaci (1), je průběh  $u(\lambda)$  snadno pochopitelný. Minimální energie potřebná k emisi

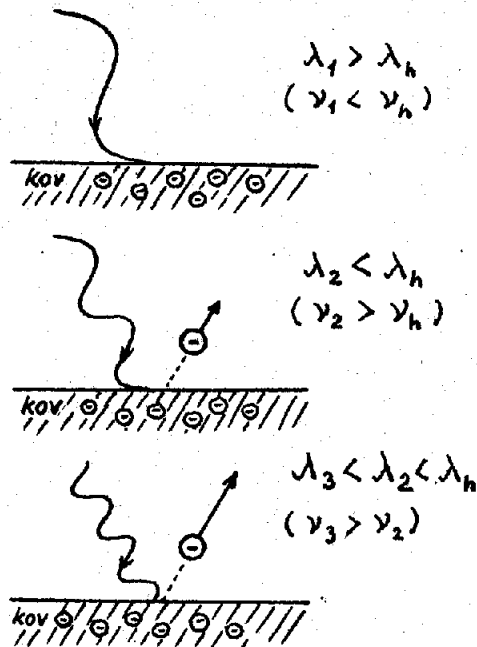
vlny s vlnovou délkou  $\lambda$  je  $hc/\lambda$ ; pro malé vlnové délky bude tato hodnota tak velká, že při dané teplotě  $T$  bude pravděpodobnost emise těchto vln zanedbatelná<sup>\*)</sup>. Dostáváme tak konečný počet skutečně nabuzených vln v dutině černého tělesa, přičemž minimální vlnové délky jsou řádově  $\lambda \approx hc/\kappa T$ .

Úplná Planckova formule pro spektrální hustotu zářivé energie  $u(\lambda)$  v dutině černého tělesa při teplotě  $T$  je

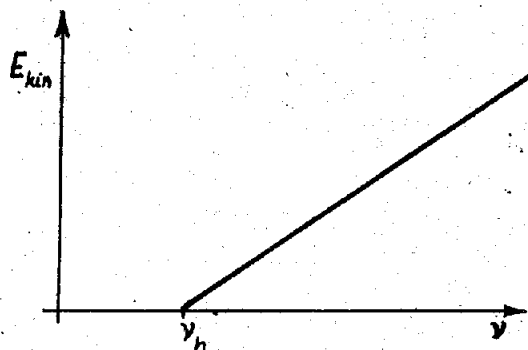
$$u(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda \kappa T}\right) - 1} \quad (2)$$

### 1.2) Fotoefekt a Einsteinovy fotony

Fotoefekt - emise elektronů z kovů při dopadu viditelného nebo ultrafialového záření - byl pozorován již v minulém století. Sám jev nebyl záhadný; že jsou v kovu volně pohyblivé elektrony se předpokládalo (např. při výkladu elektrické vodivosti) a energii potřebnou k překonání vazby, která je držela v objemu kovu, mohla dodat elektromagnetická vlna (elektrické pole světelné vlny působí na elektron silou úměrnou intenzitě pole  $E$ ; intenzita světla  $I \sim E^2$ ). Překvapující a pro tehdejší (klasickou) fyziku nevysvětlitelné byly však pozorované zákonitosti (obrázky 3, 4):



Obr. 3



Obr. 4

Závislost kinetické energie emitovaných elektronů na frekvenci dopadajícího světla. Směrnice přímky je pro všechny emitující materiály stejná, mění se jen  $\nu_h$ .

<sup>\*)</sup> Pravděpodobnost nabuzení oscilátoru do stavu s energií  $E$  při teplotě  $T$  je úměrná Boltzmannovu faktoru  $\exp(-E/\kappa T)$ ; po dosazení z (1) je to  $\exp(-hc/\lambda \kappa T)$ , kde  $\kappa = 1,38066 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$  je Boltzmannova konstanta.

- (i) k emisi docházelo jen pro světlo s frekvencí  $\nu > \nu_h$ , přičemž hraniční frekvence  $\nu_h$  byla pro různé kovy obecně různá;  
 (ii) kinetická energie vyletujících elektronů závisela jen na frekvenci světla a to lineárně (obr.4). Růst intenzity světla dané frekvence zvětšoval pouze počet emitovaných elektronů, nikoliv jejich energii.

Z hlediska klasické fyziky mělo zvětšení intenzity světla vést ke zvětšení intenzity elektrického pole vlny a to mělo urychlit elektron na větší rychlost při výstupu z kovu; to však nikdy pozorováno nebylo.

Uvedené zákonitosti jednoduše objasnil r.1905 A.Einstein když předpokládal, že energie monochromatické světelné vlny s frekvencí  $\nu$  se může elektronům v kovu předávat jen po kvantech  $h\nu$ . Jinými slovy: představíme-li si, že dopadající monochromatická světelná vlna reprezentuje tok částic z nichž každá má energii  $h\nu$  a může být zcela pohlcena elektronem, potom elektron při tom získá energii  $h\nu$ . Jestliže k vytržení elektronu z kovu je nutná energie  $A$ , bude kinetická energie vyletujícího elektronu

$$T = h\nu - A \quad (3)$$

Veličina  $A$  se nazývá výstupní práce dané látky; je to materiálová konstanta nezávislá na  $\nu$ . Závislost (3) je na obr.4, přičemž  $\nu_h = A/h$ . Zvětšení (zmenšení) intenzity monochromatické vlny s frekvencí  $\nu$  znamená zvětšení (zmenšení) počtu dopadajících částic - fotonů - s energií  $h\nu$  a tím i zvětšení (zmenšení) počtu emitovaných fotoelektronů.

Objasnění mechanismu fotoefektu bylo dílčím výsledkem práce, v níž A. Einstein ukázal, že Planckovu formuli lze získat, předpokládáme-li, že elektromagnetické vlnění v dutině černého tělesa má korpuskulární charakter. Vyjádříme-li Planckovu formuli (2) pomocí frekvencí  $\nu$ <sup>+</sup>, dostaneme spektrální hustotu zářivé energie  $u(\nu)$  při teplotě  $T$  (tj. energii v jednotkovém objemu dutiny na jednotkový interval  $\nu$ )

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \quad (4)$$

Protože výraz  $(8\pi\nu^2/c^3)d\nu$  udává počet stojatých vln v intervalu  $(\nu, \nu + d\nu)$  (viz např. [15]) a  $h\nu$  je energie jednoho fotonu, můžeme výraz

$$\langle n_\nu \rangle_T = \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \quad (5)$$

interpretovat jako střední hodnotu počtu fotonů s energií  $h\nu$ , připadající na jeden oscilátor v rovnovážném stavu při teplotě  $T$  v jednotkovém objemu dutiny černého tělesa.

<sup>+</sup>) Energie připadající na interval  $(\lambda, \lambda + d\lambda)$  je  $u(\lambda)d\lambda$  a na interval  $(\nu, \nu + d\nu)$  je  $u(\nu)d\nu$ . Protože musí platit  $u(\lambda)d\lambda = u(\nu)d\nu$ , je

$$u(\nu) = u(\lambda) \left| \frac{d\lambda}{d\nu} \right| = u(\lambda) \frac{c}{\nu^2}$$

Po úspěšném rozvoji optiky v XIX.století, završeném Maxwellovou teorií, se zdálo, že vlnová povaha světla je nepochybná. Einsteinova práce však ukazovala, že k objasnění některých jevů bude nutné přijmout částicovou (korpuskulární) představu i když k výkladu jiných (interference, difrakce, ohyb) bude zase třeba zůstat u představy vlnové. Budoucnost ukázala, že tato dvojakost projevů světla, tzv. korpuskulárně-vlnový dualismus, patří spolu s nespojitou změnou - kvantováním - některých fyzikálních veličin, k základním charakteristikám mikrosvěta.

### 1.3) Optická čarová spektra a stavba atomů

Experimentální studium spekter, započaté v XVII.století Newtonem, vyvrcholilo v letech 1859-60 pracemi G.Kirchhoffa a R.Bunsena. Dva základní zákony sformulované G.Kirchhoffem :

(i) každý prvek má své neměnné čarové spektrum,

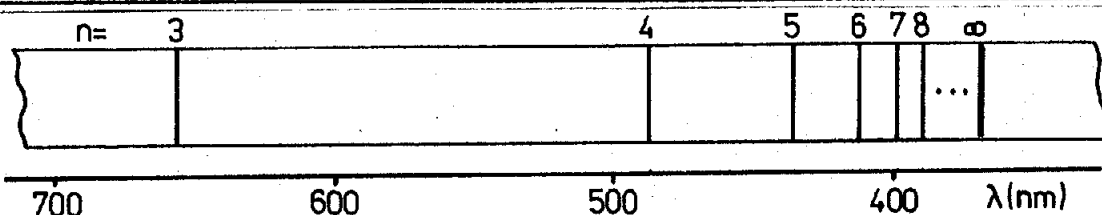
(ii) každý prvek je schopen pohlcovat takové záření jaké může též emitovat ,

byly základem pro rozvoj emisní a absorpční spektrální analýzy, která se brzy poté začala skvěle uplatňovat i při pátrání po nových chemických prvcích.

Mechanismus vzniku čarových a dokonale reprodukovatelných spekter, jednoznačně identifikujících prvky, však byl začátkem století hádankou, jejíž řešení zřejmě bezprostředně souviselo s problémem stavby atomů. První kvantitativní závislosti v teorii spekter byla formule odvozená empiricky r.1885 J.Balmerem pro vlnové délky odpovídající tehdy známým čarům vodíkového spektra (obr.5)

$$\lambda_n = b \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad (n = 3, 4, \dots, 11) \quad (6)$$

kde  $b = 3645,6 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ .



Obr. 5 Balmerova serie ve vodíkovém spektru

Přejdeme-li v (6) k vlnočtům  $\sigma = 1/\lambda$ , bude

$$\sigma_n = R_\infty \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, \dots, 11) \quad (7)$$

kde  $R_\infty = 109\,720 \text{ cm}^{-1}$  je dnes známa jako Rydbergova konstanta.

Balmerova formule ve tvaru (7) navozuje myšlenku, že mohou existovat i jiné serie čar, pro něž by platilo

$$\sigma_{mn} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (8)$$

kde  $m, n$  jsou celá čísla .

Skutečně, r. 1908 objevil Lyman v ultrafialové oblasti serii odpovídající  $m = 1$  a  $n = 2, 3, 4, \dots$  a též rok Paschen našel v infračervené oblasti serii s  $m = 3$  a  $n = 4, 5, 6, \dots$ . Vyvození formule (8) se stalo prvním úkolem a základním testem všech budoucích teorií.

Poznatky o struktuře hmoty, nahromaděné do konce XIX. století, vedly r. 1902 lorda Kelvina k následujícímu modelu atomu: podstatná část hmoty atomu spojená s kladným nábojem tvoří malou kouli, v níž jsou umístěny lehké, záporně nabitě, elektrony (jako "hrozinky v buchtě"). Jako celek byl atom elektricky neutrální a v základním stavu byly náboje nepohyblivé.

Kelvinův model téměř patnáct let propracovával J.J. Thomson, takže je znám spíše jako Thomsonův model atomu. Thomson především hledal konfigurace, které by při daném rozložení kladného náboje byly stabilní (protože soustava kladných a záporných nábojů nemůže být držena ve stabilní rovnováze jen elektrostatickými silami, muselo se předpokládat, že kladný náboj je držen pohromadě zatím neznámými neelektrickými silami); velmi stabilní konfigurace měly odpovídat inertním plynům, méně stabilní pak chemicky aktivním prvkům. Jestliže se atom dostal, např. v plameni, do excitovaného stavu, zůstal kladný náboj v klidu, zatímco lehké elektrony začaly kmitat a vyzařovat elektromagnetické vlnění. Aby vlnová délka emitovaného záření byla ve viditelné části spektra, musel lineární rozměr atomu být řádově  $10^{-8}$  cm, což krásně souhlasilo s odhady plynoucími z kinetické teorie plynů. Kvantitativní výpočet spekter se však Thomsonovi nepodařil.

První experimenty přímo zaměřené na vyjasnění struktury atomu byly realizovány v r. 1909 pod vedením Ernesta Rutherforda. Geiger a Marsden ostřelovali tenkou zlatou folii (na tloušťku folie mělo připadat asi 400 atomů)  $\alpha$ -částicemi a měřili jejich odchylky od původního směru po průchodu folií. Protože hmotnost, náboj a rychlost (energie)  $\alpha$ -částic byly známy, bylo možné odhadnout (elementární způsob je např. v [9]) o jaký úhel by se měly odchýlit při interakci s Thomsonovým atomem (vzhledem k velké hmotnosti  $\alpha$ -částic bylo možné uvažovat jen rozptýl kladným nábojem, rovnoměrně rozloženým v kouli s průměrem asi  $10^{-8}$  cm). Očekávané odchylky byly velmi malé, méně než  $1^\circ$ . K všeobecnému překvapení však Geiger s Marsdenem zjistili, že malá část dopadajících  $\alpha$ -částic se odchýlila o velké úhly (desítky stupňů), v ojedinělých případech až o téměř  $180^\circ$ .

Rozborem získaných výsledků dospěl Rutherford v r.1911 k závěru, že k objasnění naměřených úhlových závislostí je třeba, aby celý kladný náboj ( a tedy i podstatná část hmoty ) atomu byl soustředěn v malé části prostoru - jádro atomu - s lineárním rozměrem řádově  $10^{-12}$  cm. Aby rozměr atomu zůstal asi  $10^{-8}$  cm (vyžadoval to mechanismus vzniku spekter, kinetická teorie plynů a další) , musely se v tomto prostoru nacházet elektrony. Jestliže neměly být přitaženy k jádru, musely kolem něho obíhat tak, aby přitažlivá síla kladně nabitého jádra byla kompenzována odstředivou silou. Tak vznikl Rutherfordův planetární model atomu: kolem jádra s nábojem  $+Ze$  ( $Z$  je atomové číslo prvku) obíhá  $Z$  elektronů s nábojem  $-e$ .<sup>+</sup>)

Tento model však nastolil mnoho nových otázek, na něž klasická fyzika nemohla dát odpověď. Základním problémem byla samotná existence takového atomu. Podle Maxwellovy elektrodynamiky musí náboj pohybující se zrychleně (elektrony v Rutherfordově atomu mají dostředivé zrychlení) vyzařovat elektromagnetické vlnění. Elektron obíhající kolem jádra by tedy měl vyzařovat na úkor své energie, což by vedlo k postupnému zmenšování poloměru dráhy (pohyb po spirále) a konečně pádu na jádro; to vše by se mělo odehrát asi za  $10^{-9}$  s a elektron by přitom vyzařoval spojité spektrum. Velikou záhadou byla dále stabilita atomů, projevující se neměnností spekter. Vždyť podle Newtonovy mechaniky byly možné elektronové orbity s libovolnými poloměry ( a tedy i dobami oběhu). Frekvence emitovaného světla je však určována oběžnou frekvencí; proč tedy např. všechny vodíkové atomy mají absolutně stejné spektrum ? Proč není spektrum nijak ovlivňováno srážkami atomů k nimž musí např. v plynu ve výbojové trubici nutně docházet; při srážce dvou atomů by přece mělo dojít ke změně drah elektronů. Nebo: jak vůbec vznikají serie spektrálních čar ? A další otázky a co otázka, to záhada.

## 2. Stará kvantová teorie

Názvem stará kvantová teorie se dnes rozumí kvantová teorie rozpracovávaná zhruba v letech 1913-1924 řadou fyziků (Bohr, Sommerfeld, Wilson a další) na základě, který v r.1913 položil mladý dánský fyzik Niels Bohr. Dále si stručně všimneme jen základních Bohrových idejí. Získáme tak nejen historickou informaci, ale jednoduše a názorně zavedeme takové fundamentální veličiny jako je ionizační energie atomu vodíku, a Bohrův poloměr. Navíc, i když Bohrův model vybudovaný na představě

---

<sup>+</sup>) Pro úplnost nutno dodat, že podobný model (ovšem bez uvedeného experimentálního podkladu) navrhl r.1903 japonský fyzik H.Nagaoka. Pro zjevný rozpor s klasickou elektrodynamikou však nebyl přijímán.



klasických trajektorií je nekompstibilní s novou kvantovou teorií, přece řada intuitivních představ, s nimiž pracuje, je ve shodě se závěry kvantové mechaniky.

## 2.1) Bohrovy postuláty

V r.1913 uveřejnil N. Bohr serii tří prací v nichž se pokusil o spojení Planckovy a Einsteinovy kvantové hypotézy s Rutherfordovým modelem atomu; jeho cílem bylo objasnit především stabilitu atomu a vznik čárových spekter. Uvědomoval si přitom jasně, že nahromaděný experimentální materiál zjevně svědčí proti extrapolaci klasické mechaniky a elektrodynamiky do atomových dimensí, v nichž nikdy předtím nebyly experimentálně ověřovány.

Bohrovy předpoklady a závěry lze shrnout takto:

- (i) Elektron v atomu se může nacházet jen na kruhových orbitách, jejichž poloměr  $R$  vyhovuje podmínce

$$mvR = n \frac{h}{2\pi} \quad (= n\hbar) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (9)$$

kde  $m$  je hmotnost elektronu a  $v$  je jeho rychlost.

Na těchto stacionárních drahách elektron nevyzařuje elektromagnetické vlnění.

- (ii) Atom emituje nebo absorbuje elektromagnetické záření pouze při přechodu elektronu z jednoho stacionárního stavu do druhého. Při přechodu ze stavu s energií  $E_i$  do stavu s energií  $E_f$  se emituje ( je-li  $E_i > E_f$  ) nebo absorbuje (  $E_f > E_i$  ) foton s energií  $h\nu$  (monochromatické vlnění s frekvencí  $\nu$  ), ve shodě s Planckovou hypotézou, takže

$$h\nu = E_i - E_f \quad (10)$$

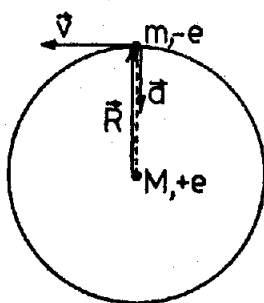
Podmínka (9) vyjadřuje kvantování momentu hybnosti elektronu  $\vec{L} = m\vec{v} \times \vec{R}$ ; kvantování energie elektronu je jejím důsledkem.

## 2.2) Atom vodíku v Bohrově teorii

Atom vodíku je podle Rutherforda a Bohra tvořen jádrem s hmotností  $M$  a nábojem  $+e$ , kolem něhož obíhá elektron s hmotností  $m$  a nábojem  $-e$  (obr.6). Protože  $M \approx 2000m$ , můžeme s dobrou aproximací považovat jádro za nehybné. Velikost dostředivého zrychlení elektronu, který se pohybuje rovnoměrně rychlostí  $v$  po kruhové orbitě s poloměrem  $R$ , je

$$a = v^2 / R \quad (11)$$

Mezi jádrem a elektronem působí podle Coulombova zákona přitažlivá síla velikosti



Obr. 6.

$$F = \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{R^2} \quad (12)$$

Podle 2. Newtonova zákona  $F=ma$ , takže dvojnásobek kinetické energie  $2T$  je

$$mv^2 = \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 R} \quad (13)$$

Protože potenciální energie elektronu na orbitě je

$$V = - \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{R}, \quad (14)$$

je celková energie  $E = T + V$  rovna

$$E = - \frac{1}{2} \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 R} \quad (15)$$

Z (13) a kvantové podmínky (9) (velikost momentu hybnosti  $\vec{L} = m\vec{v} \times \vec{R}$  je  $L=mvR$  neboť  $\vec{v} \perp \vec{R}$ ) dostaneme poloměry stacionárních orbit

$$R_n = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} n^2 \quad (n=1,2,\dots) \quad (16)$$

Dosazením do (15) získáme celkovou energii v n-tém stacionárním stavu

$$E_n = - \frac{1}{2} \frac{m e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = - \frac{1}{2} \frac{e^2}{(4 \pi \epsilon_0) R_n} \quad (n=1,2,\dots) \quad (17)$$

Základní stav (s nejnižší energií) atomu vodíku odpovídá kvantovému číslu  $n = 1$ ; poloměr příslušné orbity  $R_1$  je tzv. Bohrův poloměr

$$a_0 = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (18)$$

a energie elektronu na této orbitě je

$$E_1 = - \frac{1}{2} \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 a_0} = - 13,606 \text{ eV} \quad (19)$$

Hodnota  $I_1 = -E_1 = 13,606 \text{ eV}$  je známá ionizační energie (ionizační potenciál) pro vodíkový atom, tj. energie potřebná k odtržení elektronu

od jádra (převedení ze stavu s  $n=1$  do stavu s  $n \rightarrow \infty$ ).

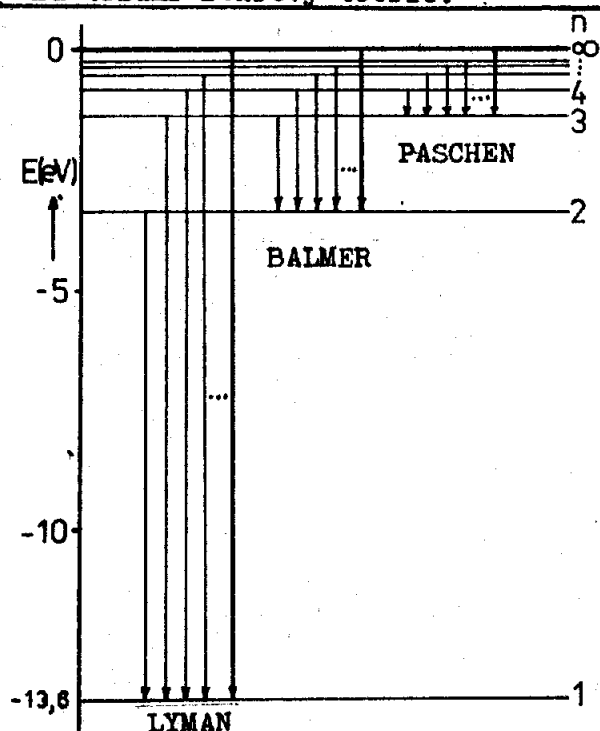
Frekvence  $\omega_{nm}$  světla emitovaného při přechodu elektronu z hladiny  $E_n$  na  $E_m$  ( $n > m$ ) (obr.7) je podle (10)

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{m e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (20)$$

Dělením  $2\pi c$  ( $\sigma = \omega / 2\pi c$ ) dostaneme vlnočty  $\sigma_{mn}$  a porovnáním s (8) výraz pro Rydbergovu konstantu

$$R_{\infty} = \frac{m e^4}{4\pi (4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3 c} \quad (21)$$

Odvození zobecněného Balmerova vztahu (8) a velice dobrá shoda Rydbergovy konstanty vypočtené podle (21) s hodnotou naměřenou, znamenaly vskutku triumf Bohrově teorie.



Obr. 7

Přechody vedoucí ke spektrálním seriím ve spektru vodíku.

Přechody v opačném směru odpovídají absorpčním čarům.

### 2.3) Princip korespondence

Princip korespondence byl explicitně zformulován N.Bohrem až v roce 1923, i když implicitně je obsažen již v jeho dřívějších pracích. Smyslem tohoto principu bylo vyjasnit, do jaké míry pojmy a výsledky klasické mechaniky mohou být užitečné při tvorbě a interpretaci kvantové teorie.

Klasická mechanika správně objasňuje široké spektrum fyzikálních jevů v makrosvětě a v některých případech i v mikrosvětě (např. pohyb nabitých částic ve statických elektrických a magnetických polích, tepelný pohyb atomů a molekul v plynech atd.); hlavní potíž, s níž se nemohla v oblasti mikrosvěta vypořádat, spočívala v existenci nespojitých (kvantových) změn některých veličin. Můžeme proto požadovat, aby v případech kdy kvantové skoky jsou malé (a to nastane pro velká kvantová čísla jak je vidět např. ze změn  $\Delta E$  pro  $n \rightarrow \infty$  v (17)), se výsledky kvantové a klasické teorie shodovaly (korespondovaly).

Ukažme si aplikaci tohoto principu na výrazu (17) pro energii elektronu v atomu vodíku. Změna velkého kvantového čísla  $n$  o jednotku vede k malé změně  $E$ . Aproximujeme-li tuto změnu diferenciálem, je

$$\Delta E = \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^3} \Delta n$$

Frekvence světla emitovaného při přechodech mezi hladinami s vysokými kvantovými čísly tedy je

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 (\hbar n)^3} \Delta n$$

Protože  $\hbar n$  je (viz (9)) moment hybnosti  $m\Omega R^2$ , kde  $\Omega$  je kruhová frekvence ( $\Omega = v/R$ ) elektronu na orbitě, platí

$$\omega = \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m^3 \Omega^3 R^6} \Delta n$$

Po dosazení za  $m^3 \Omega^3 R^6$  z (13) obdržíme

$$\omega = \Omega \cdot \Delta n$$

Pro  $\Delta n = 1$  je tedy frekvence emitovaného světla  $\omega$  shodná s klasickým výsledkem, který je roven právě  $\Omega$ . Pro  $\Delta n = 2, 3, \dots$  dostáváme vyšší harmonické této základní frekvence.

Princip korespondence má zásadní význam: jestliže totiž kvantová mechanika aspiruje na úplný popis jevů, potom musí být schopna popsat všechny fyzikální jevy, včetně těch, které byly objasněny již klasickou fyzikou. Klíčové postavení měl tento princip především v počátcích kvantové mechaniky, kdy působil jako průbířský kámen pro navrhované teorie (i když samozřejmě k jednoznačnému výběru správné teorie byl nedostačující).

## 2.4) Úspěchy, potíže a meze použitelnosti staré kvantové teorie

Stará kvantová teorie, ve své konečné podobě, umožnila značný pokrok ve studiu spekter, neboť dávala obecný návod k výpočtu spektrálních termů určité třídy atomových a molekulárních soustav. Výsledky získané pro atom vodíku bylo možné snadno zobecnit na ionty  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$  a atomy alkalických kovů; teorie byla rovněž použitelná na vibrační a rotační spektra molekul a na rentgenovská spektra atomů. Na druhé straně však narážela na značné potíže při řešení problému složitějších atomů; dokonce se ani nepodařilo dosáhnout přesné shody s pozorovaným spektrem atomu He.

Stará kvantová teorie však nebyla úplná. K jejím vážným omezením patřila skutečnost, že pravidla kvantování byla použitelná pouze na periodické pohyby. Tak zůstávala mimo rámec této teorie např. celá problematika srážek (rozptylu) mikročástic; přitom do této kategorie patří i jedny ze základních experimentů: Franckovy-Hertzovy pokusy z r. 1914, potvrzující existenci diskretních energiových hladin v atomu (viz [8]).

Principiální obtíže staré kvantové teorie však spočívaly v její logické struktuře. Empiricky zavedená kvantová pravidla představují jen čistě formální omezení, kladená na řešení klasických pohybových rovnic; bez jakéhokoli hlubšího zdůvodnění předepisují, že ze všech možných klasických řešení je třeba ponechat jen nepatrnou podmnožinu, má-li být dosaženo shody s experimentem. Přitom je navíc obtížné sladit dohromady pravidla kvantování s používaným pojmem trajektorie. Existence klasické trajektorie částice znamená, že částice má v každém okamžiku přesně určenou polohu a hybnost a tyto veličiny se spojitě mění s časem. Jak ale potom bude vypadat trajektorie elektronu ve Franckových-Hertzových pokusech, když zde elektron mění svoji energii skokem? Nebo naopak: protože existenci diskretních energiových hladin (předávání energie po kvantech) lze považovat za experimentálně prokázanou, bude zřejmě nutné opustit představu klasické trajektorie u mikročástic.

Stará kvantová teorie, tato podivuhodně vymyšlená kombinace klasické mechaniky a ad hoc zavedených kvantových pravidel, tedy nebyla - navzdory ohromným zásluhám, které si v historii fyziky vydobyla - úplnou, logicky bezespornou fyzikální teorií.