6.3.1 Atom vodíku

Předpoklady: 060209

Opakování:
Stav mikročástic je popsán vlnovou funkcí ψ, která vyhovuje Schrödingerově rovnici popisující daný problém. Většinou takových funkcí nalezneme více, často se liší pouze dosazením celočíselných konstant – kvantových čísel (u potenciálové jámy jsme dosazovali jedno kvantové číslo *n* a získali jsme tak skupinu funkcí ψ_n, ve složitějších problémech je čísel více).
Vlnová funkce:
- zcela popisuje stav částice,
- určuje rozložení pravděpodobnosti nalezení částice (druhou mocninou své absolutní hodnoty $|\psi_n|^2$),
- pomocí operátorů proměnných určuje hodnoty fyzikálních veličin (například působením Hamiltoniánu jsme získali z funkce ψ_n hodnotu energie E_n).

Hledání funkcí a jejich přesné vyjádření je matematicky značně náročné, v dalším textu se budeme zabývat pouze výsledky tohoto hledání (kvantovými čísly a rozložením pravděpodobnosti).

Atom vodíku
Jádro tvoří jediný proton, který působí na elektron přitažlivou elektrickou silou a tím mu zabraňuje uniknout z atomu. Poloha a hybnost elektronu musí splňovat relaci neurčitosti $\Rightarrow$ elektron nemůže spadnou na jádro (neurčitost polohy by byla nulová a neurčitost hybnosti pak obrovská), nachází se nejčastěji v takovém stavu, aby splnil relaci neurčitosti a přitom měl minimální energii.

Funkce, které získáme, jsou rozlišeny třemi kvantovými čísly *n*, *l*, *m*, spin elektronu *s* může nabývat dvou hodnot ($-\frac{1}{2};\frac{1}{2}$) $\Rightarrow$ stav elektronu je určen čtveřicí čísel, které zcela popisují jeho vlnovou (tato čtveřice čísel udává „adresu“, na které elektron bydlí. Můžeme si ji představit například ve tvaru *n*-číslo domu, *l*-patro, *m*-číslo bytu na patře, *s*-jeden ze dvou pokojů).

S hodnotami kvantových čísel se nemění pouze energie a typická vzdálenost od jádra, ale i rozložení pravděpodobnosti nalezení elektronů $\Rightarrow$ toto rozložení se znázorňuje nejčastěji pomocí **orbitalů** (grafické zobrazení míst s nejvyšší hodnotou pravděpodobnosti).
Není možné tvrdit, že se elektron pohybuje po orbitalu, nebo že orbital znázorňuje místo, kde se elektron nachází. Elektron je může nacházet na mnoha dalších místech, orbital je zvláštní pouze tím, že na něm je pravděpodobnost nalezení elektronu největší.

Význam a hodnoty jednotlivých kvantových čísel

Hlavní kvantové číslo *n*
$n \in N = \{1; 2; 3; ...\}$

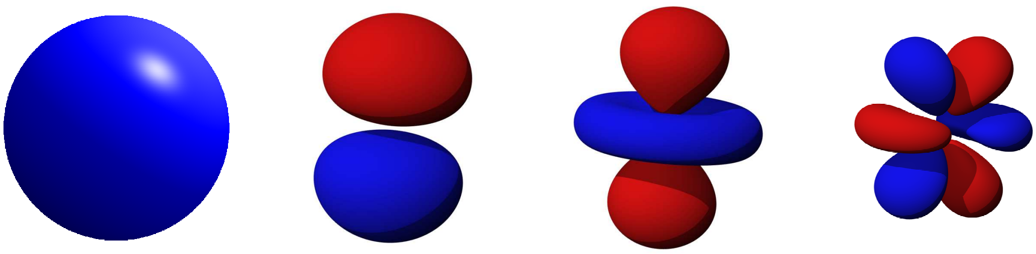
Rozhoduje o energii elektronu a „velikosti“ orbitalu (ze dvou stavů se stejným orbitalem a různým *n*, je průměrná vzdálenost elektronu od jádra větší ve stavu s větší hodnotou *n* přibližně n^2 krát)

Vedlejší (orbitalové) kvantové číslo *l*

$l \in \{0;...;n-1\}$ $\Rightarrow$ čím větší je hodnota *n*, tím více hodnot může mít vedlejší kvantové číslo *l*.

Rozhoduje o tvaru orbitalu, u prvků s více elektrony ovlivňuje velikost energie elektronu. Hodnoty vedlejšího kvantového čísla bývají velmi často popisovány písmenem místo čísla. V následujícím přehledu jsou uvedena písmena, kterými se označují hodnoty *l* spolu s tvary orbitalů.

l	**0**	**1**	**2**	**3**
	s	**p**	**d**	**f**



Označení orbitalů pomocí písmen se používá pro přehlednější zápis stavů. Například místo $n=3, l=1$ píšeme pouze $3p$.

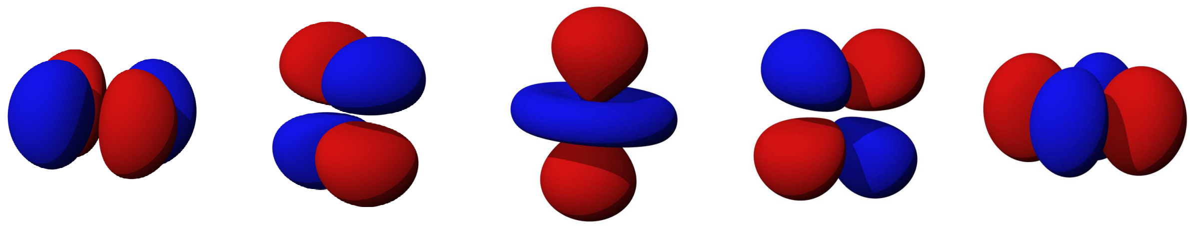
Magnetické kvantové číslo *m*

$m \in Z, m \in \{-l;...;l\}$

Rozhoduje o orientaci orbitalu v prostoru. Pokud se atom nenachází ve vnějším magnetickém poli neovlivňuje hodnotu energie elektronu (ve vnějším magnetickém poli hodnotu energie ovlivňuje, ale jeho vliv je menší než vliv předchozích kvantových čísel).

Orientace orbitalů pro $n=3$, $l=2$ (stavy $3d$)

$m=-2$	$m=-1$	$m=0$	$m=1$	$m=2$



Dodatek: Stavy s různými hodnotami čísla *m* a se stejnou hodnotou čísel *n* a *l* mají stejnou energii $\Rightarrow$ počet možných hodnot čísla *m* udává počet elektronů se stejnou hodnotou energie (odpovídají hodnotám čísel *n*, *l*). Tomuto počtu se říká stupeň degenerace. Orbital *p* umožňuje 3 různé hodnoty čísla *m*, tedy tři stavy se stejnou energií $\Rightarrow$ říkáme, že je třikrát degenerovaný. Orbital *d* je degenerovaný pětkrát.

Spinové magnetické kvantové číslo *s* (nebo m_s)

$$s \in \left\{-\frac{1}{2};\frac{1}{2}\right\}$$

Udává hodnotu spinu elektronu v daném stavu. Většinou se hodnotami tohoto čísla ani nezabýváme, důležitý je hlavně fakt, že díky dvěma hodnotám tohoto čísla se mohou dva elektrony shodovat ve všech ostatních číslech (neboli tři hodnoty čísel *n*, *l*, *m* určují "místo" pro dva elektrony).

Př. 1: Vypiš povolené hodnoty čísla vedlejšího kvantového čísla *l* pro $n = 4$.

$n = 4 \Rightarrow l \in \{0;1;2;3\}$

Př. 2: Vypiš povolené hodnoty magnetického kvantového čísla pro $l = 3$.

$l = 3 \Rightarrow m \in \{-3;-2;-1;0;1;2;3\}$

Př. 3: Vypiš všechny stavy s hlavní kvantovým číslem $n = 3$. Stavy s různou hodnotou spinu nerozlišuj.

$n = 3 \Rightarrow l \in \{0;1;2\}$

- $l = 0 \Rightarrow m = 0$
- $l = 1 \Rightarrow m \in \{-1;0;1\}$
- $l = 2 \Rightarrow m \in \{-2;-1;0;1;2\}$

$\Rightarrow$ devět stavů:

- $3s(0)$
- $3p(-1)$, $3p(0)$, $3p(1)$
- $3d(-2)$, $3d(-1)$, $3d(0)$, $3d(1)$, $3d(2)$

Dodatek: Zatímco zápis $3d$ je zcela standardní, přidání magnetického kvantového čísla do zápisu standardizováno není. Používám závorky kvůli záporným hodnotám.

Př. 4: Které z následujících stavů existují? Které ne? Proč?

a) $n = 2, l = 1, m = -1$
b) $n = 4, l = -1, m = 2$
c) $n = 3, l = 4, m = 0$
d) $3p$
e) $2d$
f) $3p(2)$

a) $n = 2, l = 1, m = -1$
Stav existuje (vyhovuje všem podmínkám).
b) $n = 4, l = -1, m = 2$
Stav neexistuje (nepovolená hodnota čísla *l*).
c) $n = 3, l = 4, m = 0$
Stav neexistuje ($l > n$, což není možné).
d) $3p$
$3p \Rightarrow n = 3,\ l = 1 \Rightarrow$ stav existuje.
e) $2d$
$2d \Rightarrow n = 2,\ l = 2 \Rightarrow$ stav neexistuje ($l = n$, což není možné).
f) $3p(2)$
$3p(2) \Rightarrow n = 3,\ l = 1,\ m = 2 \Rightarrow$ stav neexistuje (nepovolená hodnota čísla *m*).

Př. 5: Kolik kvantových stavů rozlišených čísly *l* a *m* odpovídá hodnotě hlavního kvantového čísla *n*?

Zkusíme spočítat počty stavů pro nejmenší hodnoty čísla *n*:

- $n=1 \Rightarrow l=0 \Rightarrow$ 1 stav ($m=0$)
- $n=2 \Rightarrow$
  - $l=0 \Rightarrow$ 1 stav ($m=0$)
  - $l=1 \Rightarrow$ 3 stavy ($m \in \{-1;0;1\}$)

  celkem 4 stavy
- $n=3 \Rightarrow$
  - $l=0 \Rightarrow$ 1 stav ($m=0$)
  - $l=1 \Rightarrow$ 3 stavy ($m \in \{-1;0;1\}$)
  - $l=2 \Rightarrow$ 5 stavů ($m \in \{-2;-1;0;1;2\}$)

  celkem 9 stavů
- $n=4 \Rightarrow$
  - $l=0 \Rightarrow$ 1 stav ($m=0$)
  - $l=1 \Rightarrow$ 3 stavy ($m \in \{-1;0;1\}$)
  - $l=2 \Rightarrow$ 5 stavů ($m \in \{-2;-1;0;1;2\}$)
  - $l=3 \Rightarrow$ 7 stavů ($m \in \{-3;-2;-1;0;1;2;3\}$)

  celkem 16 stavů

Zdá se, že platí: Pro hlavní kvantové číslo *n* existuje n^2 stavů (když nerozlišujeme spinové číslo).

Důkaz:

$n \Rightarrow l \in \{0;1;...,n-1\} \Rightarrow \{1;2\cdot1+1;3\cdot1+1;...;2(n-1)+1\}$ možností pro hodnoty *m*.

Všechny možnosti sečteme: $Z=1+3+5+...+2(n-1)+1 \Rightarrow$ součet prvních *n* členů aritmetické posloupnosti $s_n=\frac{n}{2}(a_1+a_n)$.

Dosadíme: $a_1=1$, $a_n=2n-1$, $n=n$: $s_n=\frac{n}{2}(a_1+a_n)=\frac{n}{2}(1+2n-1)=\frac{n}{2}2n=n^2$

Další podrobnosti je možné nalézt na adrese http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/.

Shrnutí: Stavy elektronu v atomu vodíku popisují tři kvantová čísla.