

Ján Pišút – Rudolf Zajac

O ATÓMOCH A KVANTOVANÍ

Bratislava 2010

Kniha uvádza základné poznatky z elementárnej kvantovej mechaniky bez náročného matematického aparátu. Nájdeme v nej aj prehľad o historickom vývine názorov na atómy, povahu svetla, vlastnosti žiarenia a kvantá. Dopĺňajú ju životopisné údaje o fyzikoch, ktorí podstatne prispeli k chápaniu štruktúry atómov a ich interakcie so žiarením.

Určená je všetkým čitateľom, ktorí sa zaujímajú o fyziku, najmä študentom vyšších tried stredných škôl a vyučujúcim na týchto školách.

Autor: JÁN PIŠÚT, RUDOLF ZAJAC
Názov: O atómoch a kvantovaní
Lektori: EVA TREBATICKÁ
PETER PREŠNAJDER
Vydavateľ: Knižničné a edičné centrum FMFI UK
Grafická úprava: Peter Kohaut
Rok vydania: 2010
Miesto vydania: Bratislava
Vydanie
v elektronickom tvare: prvé
Počet strán: 186
Internetová adresa: http://www.fmph.uniba.sk/index.php?id=el_st_m

ISBN 978-80-89186-64-8

OBSAH

Predhovor	5
1 Úvod	9
1.1 Trocha histórie na úvod alebo ako sa vyvíjali predstavy o atónoch	9
1.2 Niektoré z významných postáv prvej kapitoly	12
2 Aké veľké sú atómy a z čoho sa skladajú	17
2.1 Avogadrova konštanta a veľkosť atómov	17
2.2 Elementárny náboj, hmotnosť elektrónu	19
2.3 Rutherfordov objav atómového jadra	21
2.4 Žiarenie zahriatych telies a fotoelektrický jav . Objav elementárneho kvanta energie	24
2.5 Čiarový charakter atómových spektier – Bohrovo vysvetlenie	30
2.6 Bohrov model atómu vodíka	32
2.7 Kvantovanie energie atómov ako experimentálny fakt. Pokusy Francka a Hertza	39
2.8 Zhrnutie základných veličín	42
2.9 Múdrosť vchádza do hlavy rukou , alebo niekoľko úloh a príkladov	43
2.10 História spektrálnej analýzy	49
2.11 Postavy, o ktorých sa píše v druhej kapitole	53
3 Súvislosti medzi základnými veličinami atómovej fyziky alebo rozmerová analýza a kvalitatívne odhady	69
3.1 Úvod	69
3.2 Rozmerová analýza – metóda na rýchle získanie približného výsledku	70
3.3 Rozmerová analýza a vlastnosti atómov	73
3.4 Niekoľko poznámok na záver . Odporúčaná literatúra	75
4 Vlnové vlastnosti častíc	76
4.1 Úvod	76
4.2 Vlny v klasickej fyzike	76
4.3 De Broglieho hypotéza	85
4.4 De Broglieho myšlienka o pôvode kvantovej podmienky v Bohrovom modeli atómu vodíka	87
4.5 Davissonov a Germerov experiment	88
4.6 Od sporov o tom, či svetlo sú vlny alebo častice k súčasnému „vlnovo-časticovému“ názoru na svetlo	90
4.7 Významné postavy štvrtej kapitoly	93
5 Kvantový stav elektrónu ako čistý harmonický kmit de Broglieho vlny	97
5.1 Úvod	97
5.1.1 Prehľad situácie v atómovej fyzike ku koncu roku 1924	97
5.1.2 „Podivné fakty“ si niekedy nevyhnutne vyžadujú „podivnú teóriu“	99
5.2 Diskrétne kvantový stav ako čistý harmonický kmit de Broglieho vlny	100
5.3 Elektrón viazaný na úsečku	101
5.4 Podivná vlastnosť elektrónovej vlny – odpor proti stláčaniu. Príčina stability atómov	103
5.5 Energia a rozmer stojatej vlny pre základný stav lineárneho harmonického oscilátora	105
5.6 Energia a rozmer stojatej elektrónovej vlny pre základný stav atómu vodíka	107
5.7 Niekoľko slov o Heisenbergovi a Schrödingerovi	109

6	Vlnové funkcie kvantových stavov atómu vodíka. Štruktúra zložitejších atómov	113
6.1	Úvod	113
6.2	Vlnové funkcie kvantových stavov a energia elektrónu viazaného v kocke	113
6.3	Vlnové funkcie a energie kvantových stavov atómu vodíka	115
6.4	Spin a magnetický moment elektrónu	116
6.5	Atómy s viacerými elektrónmi . Pauliho princíp	119
6.6	Exotické atómy	120
6.7	Wolfgang Pauli – vylučovací princíp a diskusie okolo spinu	123
7	Chemická väzba a štruktúra molekúl	127
7.1	Úvod	127
7.2	Najjednoduchšia molekula – ión H_2^+	128
7.3	Molekula vodíka H_2	132
7.4	Jednoduchý model štruktúry molekúl vody a čpavku	132
7.5	Štruktúra molekuly metánu . Hybridizácia sp^3	134
7.6	Hybridizácia sp^2 vo väzbách atómu uhlíka	135
7.7	Štruktúra zložitejších organických molekúl	137
7.8	Zakladatelia kvantovej chémie	140
8	Fyzikálny význam vlnovej funkcie. Vzťah neurčitosti. Schrödingerova rovnica	141
8.1	Úvod	141
8.2	Fyzikálny význam vlnovej funkcie	141
8.3	Komplexné vlnové funkcie , princíp superpozície	143
8.4	Schrödingerova rovnica	147
8.5	Schrödingerova rovnica a kvantovanie energie	151
8.6	Tunelový jav	154
8.7	Vzťah neurčitosti	154
8.8	O riešeníach Schrödingerovej rovnice pre atóm vodíka. Bohrov model z hľadiska kvantovej mechaniky	159
8.9	Max Born, krstný otec kvantovej mechaniky	163
	Príloha 1. Heisenbergova cesta ku kvantovej mechanike	165
P1.1	Úvod	165
P1.2	Žiarenie nabitých častíc kmitajúcej ako lineárny harmonický oscilátor – podľa klasickej fyziky	166
P1.3	Žiarenie nabitých častíc pri periodickom pohybe – podľa klasickej fyziky	167
P1.4	Heisenbergovo kvantovanie lineárneho harmonického oscilátora a jeho žiarenia	168
P1.5	Historické poznámky	171
P1.6	Niektoré technické podrobnosti k Heisenbergovým komutačným vzťahom	172
	Príloha 2. Kvantová mechanika, Werner Heisenberg a Slovensko	176
	Úvod	176
P2.1	Philipp Lenard a kvantová mechanika	176
P2.2	Žiarenie absolútne čierneho telesa	178
P2.3	Štruktúra atómu	179
P2.4	Na prahu kvantovej mechaniky	180
P2.5	Vznik kvantovej mechaniky a Werner Heisenberg	180
P2.6	Vlnová mechanika	182
P2.7	Príspevok Jána Fischera	182
P2.7	Heisenberg v Bratislave	183
	Záver	184
	Literatúra	165
	Register	166

PREDHOVOR

Takmer dve a pol tisícročia ľudia počúvali, že celý svet pozostáva z akýchsi atómov. Niektorí tomu verili, iní neverili, ale väčšina si myslela, že postačí, keď sa takýmito otázkami budú zaoberať nepraktickí vedci a filozofi. Až zrazu svet šokovali výbuchy atómových (presnejšie jadrových) bômb; ktorých teóriu vybudovali dve-tri desiatky fyzikov. Diskusia o atómoch prestala byť akademickou.

Dnes sa na každom kroku stretávame s výdobytkami modernej fyziky, v podstate tej istej, ktorú využívali konštruktéri jadrových zbraní. Už tridsať rokov pracujú v mnohých krajinách jadrové elektrárne a bez nich si už ani nevieme predstaviť riešenie problémov súčasnej energetickej krízy. Niet vari človeka, ktorý by nepoužíval tranzistorový rozhlasový prijímač či zariadenia založené na modernej elektronike – od školských kalkulačiek po výkonné počítače, od automatických práčok po električky s tyristorovou reguláciou. Všade sa hovorí o prevrate v riadení, ktorý spôsobili mikroprocesory. Veľký rozruch vyvolal objav laserov s nedozernými možnosťami využitia od základného fyzikálneho výskumu po nahradenie chirurgických nožov v medicíne.

Vyriešili sa mnohé dlho nevytlúštené záhady. Spomeňme zdanlivo jednoduché otázky: Prečo držia pokope dva atómy v molekule vodíka? Ako vyžarujú a pohlcujú atómy svetlo? Z čoho sa skladajú atómové jadrá? Prečo sa správajú látky pri nízkych teplotách podstatne inak ako pri izbových? Čo je supravodivosť a supratekutosť?

Mnohé praktické vymoženosti by neexistovali a spomínané záhady by ostali nevysvetlené, nebyť kvantovej mechaniky – teórie mikročastíc, o ktorú sa opiera moderná fyzika. Ale cena za tento úspech bola skutočne veľká. Fyzici museli prekonať zaužívaný spôsob myslenia, osvojiť si nové pojmy alebo nový zmysel „bežných“ pojmov a zvládnuť náročný matematický aparát. Preto boli niektorí odborníci toho názoru, že teória mikrosвета nie je prístupná ľuďom bez špeciálneho fyzikálneho a matematického vzdelania. A toto špeciálne vzdelanie nebolo možné zaradiť do stredoškolského vyučovania.

Takáto situácia vznikala napokon vždy, keď fyzika prešla revolučnými zmenami. V čase keď vyšli Newtonove Matematické princípy prírodnej filozofie porozumelo tejto knihe len niekoľko ľudí. Neskôr si však princípy klasickej fyziky osvojil počas štúdia každý stredoškolač. Nachádzame ich – na úrovni svojej doby – aj v prvej slovenskej učebnici fyziky, ktorú napísal Ivan Branislav Zoch a vydal František Xaver Škarniceľ v roku 1869.

Podobne sa vyvíjalo chápanie Maxwellovej elektrodynamiky a Einsteinovej teórie relativity. Sprvu im rozumelo iba niekoľko „vyvolených“, ale teraz, po práci mnohých pedagógov, sa princípy týchto hlbokých a krásnych teórií vyučujú viac-menej primeraným spôsobom na gymnáziách v celom svete.

V tejto knihe sa pokúšame vysvetliť základné myšlienky kvantovej fyziky bez použitia náročného matematického aparátu. Snažili sme sa písať ju tak, aby bola prístupná žiakom vyšších tried strednej školy.

V texte je len málo miest, kde používame diferenciálny počet. Čitateľ, ktorý ho neovláda, môže príslušné miesta preskočiť bez toho, aby stratil nič fyzikálneho výkladu.

Na kvantovú mechaniku, ako aj na každú fyzikálnu teóriu sa možno pozeráť aspoň z troch hľadísk. Prvé je historické hľadisko, ktoré sleduje zrod novej teórie. Tu vidno, ako experimentálne fakty spolu s ich analýzou postupne viedli k vytváraniu pojmov, vychádzajúcich za rámec starej teórie, ako vznikala jednotný pohľad na problémy štruktúry atómov a molekúl a na otázky vzájomného pôsobenia atómov a žiarenia.

Pri historickom pohľade vidno tiež, ako sa dôsledky rodiacej sa teórie porovnávali s výsledkami staršej teórie a ako sa postupne zväčšovala schopnosť novej teórie vysvetľovať známe experimenty a predpovedať nové výsledky.

História vzniku kvantovej mechaniky je zložitá — je to cesta so zákrutami, s dočasným blúdením a s prekonávaním prekážok. V populárnej knihe nemožno putovať po krivolakých chodníkoch, budeme postupovať až po neskôr vybudovanej diaľnici. Aby sme čitateľovi aspoň trochu priblížili túto cestu

i ľudí, ktorí po nej s námahou kráčali, uvádzame za každou kapitolou informáciu o fyzikoch, ktorí podstatne prispeli k výsledkom spomínaným v danej kapitole. Pokiaľ to bolo možné, snažili sme sa naznačiť aj myšlienkové postupy a postoje vedcov k fyzikálnym aj nefyzikálnym otázkam obdobia, v ktorom pôsobili.

Druhým hľadiskom, z ktorého sa možno na kvantovú teóriu pozerat', je pohľad cez súčasnú štruktúru teórie. Takto môžeme zhrnúť do jediného celku výsledok dlhého historického vývoja. Podobne ako pri klasickej mechanike, kde možno základné princípy zhrnúť do troch Newtonových pohybových zákonov, aj kvantovú mechaniku možno formulovať použitím niekoľkých základných postulátov. Z nich potom už deduktívnym spôsobom vyplývajú predpovede kvantovej mechaniky, pričom medzi predpoveďami nenachádzame nijaké protirečenia.

Pokusu o takýto výklad sme sa vzdali jednak preto, že nie je vhodný na prvé zoznámenie sa s kvantovou mechanikou a jednak preto, že tento prístup by si vyžadoval znalosť komplikovaného matematického aparátu. Treba ale priznať, že výber toho, čo z histórie kvantovej mechaniky spomíname, bol silne ovplyvnený konečným výsledkom, ku ktorému teória napokon dospela. Pretože sa vyhýbame zložitému aparátu, snažíme sa dôležité prvky teórie ilustrovať riešeniami jednoduchých príkladov. Veríme, že čitateľ takto pochopí, ako asi kvantová mechanika pracuje aj pri riešení zložitejších úloh. Často používame aj zjednodušené modely reálnej situácie, snažíme sa ale, aby zjednodušenia neboli ústupom od princípov kvantovej mechaniky.

Tretie hľadisko je „remeselné“. Fyzik vždy používa teóriu na riešenie určitých konkrétnych problémov a na to potrebuje základné techniky či pracovné postupy mať v „ruke“. Na niektorých miestach preto uvádzame aj príklady k preberanej látke. Určitú fyzikálnu teóriu môžeme skutočne zvládnuť len vtedy, ak ju chápeme zo všetkých troch hľadísk. Lenže nestačí iba tieto hľadiská prebrať dôkladne jedno po druhom. Jediný spôsob je postupné prechádzanie od jedného k druhému a postupné prehĺbovanie všetkých troch (zdôraznime ešte raz, že prvé dve bez tretieho nestačia).

Predkladaná kniha je len prvým zoznámením sa so základnými myšlienkami kvantovej mechaniky a čitateľ, ktorý sa s ňou chce zaoberať hlbšie, bude sa musieť ešte „prehrýzť“ rozsiahlejšími učebnicami, ktoré používajú oveľa náročnejší matematický aparát.

V prvých siedmich kapitolách sme sa dôsledne vyhýbali vyššej matematike. Posledná ôsma kapitola je po matematickej stránke náročnejšia a na niektorých miestach nebude prístupná žiakom vyšších tried gymnázia. Možno im naznačí, s čím sa stretnú pri ďalšom štúdiu kvantovej mechaniky a možno bude trochu užitočná pre ich učiteľov.

V druhom vydaní knihy sme opravili niektoré tlačové chyby a nedopatrenia. Text sme doplnili staťou o Bohrovom modeli atómu, ktorý mal veľký význam pre vznik kvantovej mechaniky. Pravda, úsilie N. Bohra vytvoriť novú teóriu mikročastíc prekročilo rámec jeho pôvodného modelu atómu z roku 1913. Niektoré historické pasáže si vyžiadali doplnky, najmä sme považovali za užitočné doplniť 2. kapitolu krátkym prehľadom histórie spektrálnej analýzy.

Autori sú veľmi vďační recenzentom RNDr. Eve Trebatickej, profesorky gymnázia A. Markuša v Bratislave a RNDr. Petrovi Prešnajderovi, CSc., z Ústavu fyziky a biofyziky Univerzity Komenského v Bratislave za starostlivé prečítanie knihy, za upozornenia na nedostatky a za mnohé podnetné návrhy na zlepšenie textu. Ďakujeme aj kolektívu redakcie teoretickej literatúry vydavateľstva Alfa za starostlivosť venovanú rukopisu a trpezlivosť voči autorom.

Na záver by sme chceli poďakovať Vladovi Černému za užitočné diskusie ku koncepcii aj k podrobnostiam textu a Gitke Šafaříkovej za starostlivú prácu s rukopisom.

*Ján Pišút
Rudolf Zajac*

Predhovor k vydaniu po 22 rokoch

Knižka „O atónoch a kvantovaní“ vyšla vo vydavateľstve ALFA (tu by sa mi žiadalo dodať „blahej pamäti“, lebo to bolo naozaj dobré vydavateľstvo) v dvoch vydaniach v rokoch 1983 a 1988. V porovnaní s prvým vydaním bolo druhé doplnené a rozšírené. Základom pre toto prvé elektronické vydanie je druhé knižné vydanie z roku 1988. Údaj o 22 rokoch v nadpise predhovoru je počítaný od druhého knižného vydania.

Elektronické vydanie vzniklo vďaka práci Petra Kohauta, ktorý knižné vydanie oskenoval a prepracoval do počítačového textu aj s formulkami a obrázkami. Za to, že toto vydanie bude „oficiálne“ so všetkými potrebnými atribútmi sme vďační Ester Prešnajderovej.

Elektronické vydanie má prirodzene rovnaký účel ako obidve staršie knižné vydania. V prvom rade je určené študentom vyšších tried gymnázia, ktorí majú hlbší záujem o fyziku. Môže byť užitočné aj pre ich učiteľov pri vedení fyzikálnych krúžkov na gymnáziu a pri práci s talentovanými žiakmi.

Knižka sa používala v minulosti aj na seminároch o kvantovej fyzike pre budúcich učiteľov fyziky na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského.

Kvantová mechanika je pomerne ťažká disciplína teoretickej fyziky. V podstate sa pri jej štúdiu vyskytujú dve skupiny ťažkostí. Prvou, a ľahko viditeľnou, je pomerne náročný matematický aparát. Mnoho z tohto aparátu sa pri univerzitnom štúdiu používa len v súvislosti s kvantovou teóriou. V predkladanej knižke nič z tohto materiálu nenájdete. Druhá skupina ťažkostí súvisí s pojmami kvantovej fyziky. Ony sú totiž iné ako pojmy klasickej fyziky, hoci často slovne rovnako označené. Týmto pojmovým otázkam sa knižka venuje podrobne. Viacerí vysokoškolskí študenti majú pri štúdiu kvantovej mechaniky viac problémov s pojmovým aparátom ako s matematickými otázkami. Aj pre nich by aspoň rýchle prečítanie tejto knižky a podumanie nad jej obsahom mohlo byť užitočné.

V porovnaní s knižným vydaním z roku 1988 sme pridali k publikácii dve prílohy. V prvej z nich, spísanej dolu podpísaným, nájdete opis Heisenbergovej cesty k jeho formulácii kvantovej mechaniky. Je to pomerne ťažké čítanie a ak s tým budete mať problémy, preskočte túto prílohu a pozrite si druhú prílohu napísanú priateľom Jurajom Šebestom. Nájdete v nej o niečo populárnejší opis Heisenbergovej cesty ku kvantovej mechanike spolu s informáciou o Heisenbergovej ceste do Bratislavy v roku 1943. V Šebestovej prílohe sú aj zmienky o Philippovi Lenardovi, laureátovi Nobelovej ceny narodenom v Bratislave a o jeho vynikajúcom učiteľovi Virgilovi Klattovi, ktorý pôsobil na reálnom gymnáziu v Bratislave. Keď ho navštevoval Philipp Lenard sídlilo na Primaciálnom námestí, na mieste kde je dnes Teologická fakulta Trnavskej univerzity a neskôr v dnešnej budove Hudobnej fakulty VŠMU na Zochovej ulici. Po 2. svetovej vojne pôsobil na cvičnom gymnáziu v Bratislave a na Prírodovedeckej fakulte aj profesor Ján Fischer. V 30-tych rokoch 20. storočia uskutočnil ako prvý Slovak moderné kvantovomechanické výpočty, ktoré si získali medzinárodné uznanie. Aj o tom sa dočítate v Prílohe 2.

Priznávame sa, že v niektorých otázkach je knižka trocha zastaraná. Nie je to v samotnom fyzikálnom obsahu. Kvantová fyzika bola už okolo roku 1930 v podstate uzavretou teóriou. To, čo je na knižke zastarané sú obrázky a ilustrácie použitia kvantovej teórie v javoch, ktoré boli nedávno podrobne študované. Urobiť knižku aj po týchto stránkach modernú by si však vyžiadalo viac práce a energie ako máme k dispozícii.

Napokon by som sa chcel poďakovať za spoluprácu na tejto knižke priateľovi a výnimočnému človeku osudom i charakterom, Rudovi Zajacovi, ktorý už, bohužiaľ, nie je medzi nami.

V Bratislave v marci 2010

Ján Pišút

1 ÚVOD

1.1 TROCHA HISTÓRIE NA ÚVOD ALEBO AKO SA VYVÍJALI PREDSTAVY O ATÓMOCH

K súčasnej teórii štruktúry atómov, molekúl a tuhých látok dospela fyzika po dlhej a namáhavej ceste, ktorú prekliessni mnohé generácie bádateľov v neprehľadnej spleti zdanlivo nesúvisiacich prírodných javov. V tejto knihe, žiaľ, nemôžeme sledovať všetky zákruty a slepé uličky z dejín fyziky. V labyrinte, ktorý nám história zanechala, sa zastavíme aspoň na najdôležitejších križovatkách.

Začiatok cesty, ako v mnohom inom, je u starých Grékov.¹ Atomizmus vznikol asi pred dva a pol tisícročím v spore o otázku, či existuje iba jedno nemenné vševypĺňajúce bytie, ako to tvrdili eleati, alebo či svet pozostáva z malých neviditeľných a nedeliteľných čiastočiek – atómov, ktoré sa pohybujú v prázdne, ako to tvrdil *Leukippos* v piatom storočí pred našim letopočtom. O Leukippovi vieme iba veľmi málo, a to tiež iba z podania iných. Nevedno ani, či pochádzal z maloázijského Milétu alebo z Eleje, gréckej kolónie v južnom Taliansku.

Na Leukippovo učenie nadviazal *Demokritos* z Abdéry, významný grécky filozof, ktorý pôsobil v piatom storočí pred n. l. v Aténach. Učil, že bytie sa skladá z nescíselného množstva neviditeľných, veľmi jemných čiastočiek, ktoré sa pohybujú v prázdnom priestore. Tieto čiastočky – atómy nevznikajú ani nezaničujú, sú večné a nemenné. Ale existujú medzi nimi rozdiely v tvare, veľkosti a tiaži. Tak napríklad atómy duše majú najdokonalejší tvar – tvar gule. Rozličné tvary atómov, ich vzájomné usporiadanie a poloha vytvárajú nekonečnú mnohotvárnosť prírody.

Najvýznamnejším atomistom helenistického obdobia bol *Epikuros*². Z jeho obsiahleho diela – podobne ako z Demokritových spisov – sa zachovali iba zlomky. Epikurove názory pretlmočil rímsky spisovateľ Titus Lucretius Carus v básni O podstate sveta (*De rerum natura*), ktorá donedávna patrila do fondu stredoškolského humanistického vzdelania. Silne zapôsobila aj na významných fyzikoch 20. storočia, napríklad na Alberta Einsteina a Erwina Schrödingera.³

Grécky atomizmus spočíval, tak ako celá antická filozofia, na špekulatívnych úvahách a v časoch Galileiho, Boyla, Newtona a ich následníkov prešiel aj do fyziky iba ako hypotéza. Prvé overené tvrdenia o atómových vznikli na pôde chémie. Závažným poznatkom boli stále hmotnostné pomery látok vstupujúcich do chemických reakcií.

Tieto údaje (to už boli experimentálne údaje) poskytli informáciu o relatívnych hmotnostiach atómov a ľudia vedeli, že napríklad atóm kyslíka je zhruba 16-krát a atóm uhlíka zhruba 12-krát ťažší ako najľahší atóm, t. j. atóm vodíka. Odtiaľ prídeme ľahko k záveru, že 12 kg uhlíka či 16 kg kyslíka obsahujú rovnaký počet atómov ako 1 kg vodíka. Takéto množstvo látky sa nazýva kilomólom a množstvo atómov v kilomóle sa nazýva *Avogadrova konštanta*. Aby sme ale vedeli, koľko atómov je v kilomóle a tiež

¹ Mnohé z otázok, ktoré kládli prírode grécki filozofi, sú už dnes dávno vyriešené, iné ešte čakajú na konečnú odpoveď. Do viena našej civilizácie však dali starí Gréci slobodného bádateľského ducha a základy logického myslenia. Od nich vari tiež pochádza radosť z myslenia, logickej analýzy i vášeň diskutovať a argumentovať o prírodovedných a filozofických otázkach. Dobrý odborný seminár s búrlivou diskusiou – to je dnešné priame pokračovanie najlepších tradícií starých Grékov. Prednášky a semináre bez diskusie, bez cibrenia myšlienok odpovedajú skôr tradícii veľkňazov starého Egypta či starej Perzskej ríše.

² Helenistické obdobie v dejinách antiky sa v podstate kryje s vládou dynastie Ptolemaiovcov v Alexandrii, založenej Alexandrom Veľkým. Ptolemaiovcovia vládli v rokoch 323-30 pred n. l. Poslednou vládkyňou tejto dynastie bola kráľovná Kleopatra. V helenistickom období sa rozšírila grécka vzdelanosť, kultúra a jazyk do Rímskej ríše a na Blízky východ.

³ Einstein napísal v roku 1924 predhovor k latinskému a nemeckému vydaniu Lucretiovej básne, v ktorom obdivuje atomizmus starých Grékov a ich presvedčenie o poznateľnosti a príčinnej závislosti všetkého, čo existuje. Vyzdvihuje úctu rímskych epikurovcov ku gréckej kultúre. „Kde by sa našiel v súčasnosti národ“ – píše Einstein – „ktorý by prechovával toľko ušľachtilých citov k inému súčasnému národu a vyjadril ich?“ V roku 1948 uverejnil E. Schrödinger v časopise *Annalen der Physik* článok pod nadpisom 2400 rokov kvantovej teórie, v ktorom okrem iného poukazuje na význam starej naivnej atomistiky v dejinách fyziky.

aký veľký je atóm, potrebujeme ďalšiu experimentálnu informáciu. Jej prvý náznak pochádza z Franklinových experimentov s olejom rozliatym na vode z konca 18. storočia, ale podrobnejšie a presnejšie údaje sú až z minulého storočia.

Chémia poskytla novovekej fyzike experimentálne základy atomizmu. Fyzika sa jej potom v 20. storočí odvdáčila, keď vyriešila vari najzákladnejší chemický problém, problém chemickej väzby.

Vývin atomizmu vo fyzike bol oveľa zložitejší ako v chémii. Vcelku tu možno hovoriť o dvoch etapách. V prvej etape sa fyzika dopracovala k formulovaniu fyzikálnych zákonov pomocou hypotézy o molekulách a atómoch a k experimentálnemu overeniu tejto hypotézy. V druhej etape skúmala štruktúru atómov a dokázala, že nie sú poslednými nedeliteľnými základnými kameňmi hmoty.

V prvej etape budovali fyziku na Galileiho princípe podobnosti, podľa ktorého sú mikročastice jednoduchými zmenšeninami telies, s ktorými sa stretávame v bežnom živote a podliehajú tým istým zákonom. *Isaac Newton* o tom napísal vo svojom vrcholnom diele *Matematické základy prírodnej filozofie*⁴: „Rozpriestranosť, tvrdosť, nepreniknuteľnosť, pohyblivosť a sila tiaže celku vzniká z tých istých vlastností častí. Z toho vyvodzujeme, že najmenšie časti telies sa takisto vyznačujú rozpriestranosťou, tvrdosťou, nepreniknuteľnosťou, pohyblivosťou a silou tiaže. V tom spočíva základ celej prírodovedy“.

Vo Francúzsku bol vášnivým propagátorom Newtonových myšlienok známy spisovateľ *Voltaire* (1694–1778), vari najobávanejší jazyk Európy v 18. storočí. V jeho podaní práve spomínaná Galileiho a Newtonova myšlienka znie takto: „Zvieratá, rastliny, nerasty – zdá sa, že všetko to je vybavené mierou, tiažou, množstvom a pohybom. Všetko je pružina, páka a kladka, hydraulický stroj, chemické laboratórium, od stebľa trávy po dub, od blchy po človeka, od zrnka piesku po naše oblaky“.⁵

Je len prirodzené, že ľudia sa v tomto období snažili pochopiť vlastnosti atómov a molekúl podľa tých predstáv, ktoré dobre poznali z každodennej skúsenosti⁶. Napríklad *Robert Boyle* (objavil r. 1662 niektoré základné vlastnosti plynov) si predstavoval molekuly plynu ako malé pružinky, ktoré sa so zvyšovaním teploty plynu roztáhujú a spôsobujú tým zvýšenie tlaku plynu na stenu nádoby. Lomonosov geniálne vytušil súvislosť tepelných javov s neusporiadaným pohybom molekúl, ale nesprávne predpokladal, že teplota súvisí iba s rotačným pohybom molekúl. Prvú kinetickú teóriu plynov, v ktorej teplota súvisí priamo s energiou postupného pohybu molekúl, vypracoval v roku 1738 *Daniel Bernoulli*. Žiaľ, táto práca ostala vyše sto rokov nepovšimnutá. Atómová hypotéza (až do dvadsiateho storočia to skutočne bola iba hypotéza) sa takto vyvíjala po kľukatej ceste, na ktorej sa niektoré myšlienky potvrdili experimentom a niektoré boli časom prekonané. Po sporoch s protivníkmi atómovej hypotézy *napokon A. K. Krönig, R. Clausius, J. C. Maxwell* a *L. Boltzmann* v druhej polovici minulého storočia ukázali, že vlastnosti plynov a medzi nimi i niektoré, na prvý pohľad prekvapujúce, možno vysvetliť tým, že plyn sa skladá z veľmi malých, prakticky nezávislých častíc voľne sa pohybujúcich v nádobe, v ktorej sa nachádza. Porovnanie teórie s experimentálnymi výsledkami poskytlo aj prvé spoľahlivé informácie o veľkosti a hmotnosti atómov.

Podarilo sa tiež teoreticky zdôvodniť experimentálne zistené hodnoty špecifickej tepelnej kapacity tuhých látok pri izbových teplotách. Podľa Galileiho princípu podobnosti považovali fyzici jednoatómové molekuly za tuhé guľôčky, dvojátómové molekuly za akési činky (dve tuhé guľôčky spojené pevnou väzbou) a pod.

Skúmali pohyby a vzájomné pôsobenie týchto častíc podľa Newtonovej mechaniky, pričom si „vypomohli“ štatistickými metódami, ktoré matematici používajú všade tam, kde sa zaoberajú správaním sa veľkého počtu rovnakých prvkov. Tak vznikla klasická štatistická mechanika⁷.

Keď *Albert Einstein* v roku 1905 a *Marian Smoluchowski* v roku 1906 ukázali, že nepravidelný pohyb častíc suspendovaných v kvapalinách (Brownov pohyb) vzniká v dôsledku nárazov chaoticky sa pohybujúcich molekúl na tieto častice, molekulová a atómová teória definitívne zvíťazili aj vo fyzike. Einsteinove výpočty sa potvrdili v roku 1908 Perrinovými experimentmi. A keby niekto bol ešte

⁴ Newton, I.: *Philosophiae naturalis principia mathematica*, London, 1686. Citované podľa nemeckého vydania „*Sir Isaac Newton's Mathematische Principien der Naturlehre*“, ed. J. Wolfers, Verlag R. von Oppenheim, Berlin 1872.

⁵ Bližšie pozri: Borzeszkowski, H. H., Wahsnerová, R.: *Newton und Voltaire*. Berlin, Akademie Verlag 1980.

⁶ Až v dvadsiatom storočí sa ukázalo, že základné zákony vo svete atómov a molekúl sa podstatne odlišujú od zákonov, ktoré poznáme z každodennej skúsenosti, t. j. od zákonov Newtonovej mechaniky

⁷ Na trochu abstraktnejšiu cestu pri budovaní štatistickej mechaniky v rámci klasickej fyziky nastúpil Josiah Willard Gibbs. (Od neho tiež pochádza názov štatistická mechanika.)

pochyboval o atómovej štruktúre tuhých látok, nasledovali potom Laueho práce a pokusy Braggovcov (otca a syna), na základe ktorých röntgenové lúče prechádzajúce cez kryštály umožnili zmapovať kryštalovú mriežku vytváranú jednotlivými atómami.

Nové poznatky ale viedli aj k novým problémom. Ešte pred definitívnym víťazstvom atómovej teórie, a to na prelome 19. a 20. storočia sa začali hromadiť údaje o podivnom správaní sa látky a elektromagnetického žiarenia, ktorých dôsledky možno zhrnúť do týchto tvrdení:

1. Čoraz viac sa ukazovalo, že atómy nie sú najmenšími čiastočkami hmoty, ale pozostávajú z ešte menších čiastočiek. **2.** Molekuly, atómy a ešte výraznejšie novoobjavené menšie čiastočky sa nesprávajú podľa zákonov klasickej fyziky. **3.** Mikročastice nemožno považovať za zmenšeniny makroskopických telies. Ukázalo sa, že na otázku, ako vyzerá atóm, fyzika vôbec nemôže odpovedať na základe našich bežných predstáv o makrosvete.

Na tomto mieste poukážeme iba na niekoľko experimentálnych údajov, ktoré od konca minulého storočia naznačovali vážne ťažkosti klasickej fyziky. Boli to:

- špecifické tepelné kapacity tuhých látok a viacatómových plynov pri nízkych teplotách⁸,
- vlastnosti žiarenia vysielaného zahriatymi telesami,
- fotoelektrický jav, t. j. uvoľňovanie elektrónov žiarením dopadajúcim na kov.

Pre všetky uvedené experimenty klasická fyzika dávala predpovede, ktoré s nameranými výsledkami nesúhlasili, a to ani na kvalitatívnej úrovni.

Pri analýze výsledkov, získaných pri meraní intenzity žiarenia vysielaného zahriatymi telesami, formuloval na prelome 19. a 20. storočia *Max Planck* prvýkrát kvantovú hypotézu. Podľa nej môže atóm v stene nádoby (či dutiny), v ktorej je tepelné žiarenie, prijímať alebo odovzdávať energiu tomuto žiareniu len po určitých kvantách. Hypotéza bola formulovaná veľmi skromne a mnohí ju považovali iba za dočasné formálne riešenie ťažkostí: Jej plný obsah sa objavil až o päť rokov neskôr, keď Einstein vysvetlil fotoelektrický jav tým, že predpokladal kvantovanie energie žiarenia. Podľa tejto hypotézy (neskôr nazvanej fotónovou hypotézou) môže elektromagnetická vlna s vlnovou dĺžkou λ , a frekvenciou $\nu = c/\lambda$, (kde c je rýchlosť svetla) mať len tie hodnoty energie, ktoré sú celočíselným násobkom hodnoty $h\nu$, kde h je Planckova konštanta.

Zároveň s týmto vývojom sa postupne zhromažďovali experimentálne údaje o vlastnostiach atómov – hoci mnoho fyzikov o ich existencii pochybovalo alebo ju považovalo za zbytočnú hypotézu. Postupne sa nahromadil obrovský experimentálny materiál o spektrách žiarenia vysielaného atómami, a to nielen materiál o žiarení zahriatych látok, ale aj o tom, ako sa menia vlastnosti žiarenia, ak sú atómy v elektrickom či magnetickom poli.

Koncom 19. storočia boli tiež experimentálne objavené elektróny a vznikol prirodzene predpoklad, že atómy obsahujú elektróny a že elektróny hrajú dôležitú úlohu pri štruktúre atómov. Vedelo sa tiež, že elektróny majú záporný elektrický náboj, a že atómy ako celok musia byť neutrálne. V atóme teda musí byť aj kladný náboj, ktorý dajakým spôsobom kompenzuje záporný náboj elektrónu. O tom, ako je tento náboj rozdelený, sa robili viac či menej realistické predpoklady až do slávnych Rutherfordových experimentov, v ktorých sa ukázalo, že kladný náboj je sústredený do nepatrnej časti celého objemu atómu – polomer jadra sa ukázal byť zhruba jednou desaťtisícinou polomeru celého atómu.

Prirodzenou reakciou na tento výsledok bol vznik planetárneho modelu atómu – ťažké jadro malo úlohu Slnka a ľahké elektróny obiehali okolo neho ako planéty. Ukázalo sa však, že toto nie je správne riešenie. Klasická fyzika totiž jednoznačne hovorí, že náboj, ktorý sa pohybuje so zrýchlením, musí vysieľať elektromagnetické vlny. Praktickým prípadom tohto javu sú všetky televízne či rozhlasové vysielачky. Do vysieláčiek treba samozrejme privádzať energiu, ktorá je práve rovná tej energii, ktorú anténa vyžiari vo forme elektromagnetických vln. Ak sa ale elektrón pohybuje v atóme po „planetárnej“ dráhe, nikto mu energiu zvonku nedodáva – jeho pohyb sa spomaľuje, „odstredivá“ sila už nestačí vyrovnáť príťažlivú silu od jadra a elektrón padá do jadra. Jednoduchý výpočet ukazuje, že celý tento pád trvá menej ako stotisícinu sekundy, a to odporuje každej skúsenosti. Zároveň sa vynára veľa otázok, napr. prečo sú atómy stabilné, prečo sú dva atómy vodíka vždy presne rovnaké (bolo by úplným zázrakom, aby dve planetárne sústavy boli rovnaké), akým mechanizmom atóm vysieľa žiarenie (keď

⁸ Tu je, mimochodom vidno, ako pokrok v technológii ovplyvňuje fyzikálne poznanie. Pod nízkymi teplotami totiž treba rozumieť teploty menšie ako $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$, t. j. menej ako 173 K (absolútna Kelvinova stupnica). Ďalšie znížovanie teplôt až do oblasti skvapalnenia hélia (niekoľko kelvinov) prinieslo v dvadsiatom storočí nové prekvapenie: supratekutosť a supravodivosť.

klasický opis určite nie je správny) a pod. Niektoré z týchto ťažkostí rozriešil Bohrov model atómu vodíka. Podľa Bohra sa elektrón v atóme môže pohybovať len po určitých dovolených dráhach a vyžaruje len keď „preskočí“ z jednej dráhy na druhú. Kým je na „dovolenej“ dráhe, má „udelenú výnimku“ zo zákonov klasickej fyziky a nežiari. Bohr sám vedel a často to zdôrazňoval, že jeho model je neúplným a iba predbežným riešením. Bolo to ostatne vidno aj z toho, že model dobre opisoval spektrum atómu vodíka, ale neposlúžil na vysvetlenie spektier ďalších atómov.

V dvoch veciach mal ale Bohr úplnú pravdu. Ukázalo sa, že atómy sa skutočne môžu nachádzať iba v stavoch s určitými hodnotami energie a žiarenie vysielajú pri „preskoku“ z jedného kvantového stavu do druhého. Kvantovanie energie atómov bolo totiž čoskoro potvrdené v experimentoch Francka a Hertza a vlnové dĺžky svetla vyžiareného pri jednotlivých prechodoch sa mohli presne vypočítať za predpokladu, že pri každom prechode sa vyžiari iba jeden fotón. Jeho energia E sa potom rovnala rozdielu energií medzi kvantovými stavmi atómu a z energie fotónu sa dala určiť frekvencia a vlnová dĺžka podľa vzťahu $E = h\nu = hc/\lambda$.

Ostalo už „iba“ prísť na to, aký mechanizmus je zodpovedný za vznik kvantových stavov atómu. Na tomto probléme pracovali mnohí vynikajúci fyzici desať rokov (1914–1924) až napokon „nová“ kvantová mechanika, t. j. súčasná teória štruktúry atómov, molekúl a tuhých látok vznikla prakticky zároveň v rokoch 1925–1926 v prácach *Heisenberga* a *Schrödingera*.

Heisenbergov postup je o čosi formálnejší ale všeobecnejší. Schrödingerov postup vychádzal z vlnových vlastností elektrónu, ktoré predpokladal o dva roky skôr de Broglie.

Čoskoro po tom, čo vyšli práce Heisenberga a Schrödingera, sa ukázalo, že obidve formulácie teórie sú ekvivalentné.

Nové experimentálne údaje aj staršie údaje (najmä spektroskopické) plne potvrdili novú teóriu, potvrdili vlnové vlastnosti častíc aj „fotónové“ vlastnosti žiarenia a vznikol nový jednotný obraz sveta atómov a molekúl. Kvôli úplnosti sa ešte žiada povedať – hoci s rozvojom kvantovej fyziky to priamo nesúvisí – že v roku 1905 vznikla špeciálna a v roku 1916 všeobecná teória relativity (A. Einstein). Tieto teórie spolu s kvantovou fyzikou vymedzili hranice platnosti klasickej fyziky a spolu s ňou vytvárajú náš obraz sveta. Na ňom spočíva podstatná časť našej materiálnej aj duchovnej kultúry a civilizácie.

Zo stručného historického prehľadu si čitateľ sotva môže urobiť podrobnejšiu a jasnú predstavu o rozvoji fyziky koncom minulého a začiatkom tohto storočia. Chceli sme však ukázať, aspoň stručne, ako sa jednotlivé potôčiky experimentov a ich fyzikálneho vysvetlenia zlievali do jedinej rieky súčasnej predstavy o svete. Každý z potôčikov mal svoju vnútornú logiku a svoje zákonitosti a každý z nich aj sám by snáď bol býval našiel správne výsledné koryto.

V tejto knihe budeme sledovať predovšetkým logiku jedného z niekoľkých potôčikov. Je to cesta, ktorá viedla cez predstavu o štruktúre atómu (Rutherfordove experimenty), cez potvrdenie existencie kvantových stavov (Franckove a Hertzove experimenty), cez de Broglieho hypotézu o vlnových vlastnostiach elektrónu (a jej potvrdenia v experimentoch) k Schrödingerovmu pohľadu na kvantové stavy ako stojaté elektrónové vlny.

1.2 NIEKTORÉ Z VÝZNAMNÝCH POSTÁV PRVEJ KAPITOLY

Nové fyzikálne myšlienky či predstavy nevznikali nikdy „ako také“, ale vytvárali ich určití ľudia, ktorí žili v určitých historických epochách. Každý veľký fyzik či mysliteľ-prírodovedec vyrástol, bol vzdelávaný a žil v predstavách svojho obdobia a práve tie mu prichodilo v niečom prekonať. Jeho myšlienky tak vytvárali základy vzdelania a výchovy ďalších generácií, ktoré ich zas dopĺňali, upravovali či prekonávali. Navyše myslenie každého prírodovedca bolo podstatne ovplyvnené myšlienkovými prúdmi daného obdobia a významné výsledky prírodných vied spätne ovplyvňovali zasa myslenie⁹. Takto je prírodovedné poznanie časťou kultúry a civilizácie.

Najkrajšie by, pravdaže, bolo vidieť celý prúd prírodných vied, kultúry, filozofie, techniky atď. naraz, ale prakticky sa to nedá. Aby sme všetko aspoň trochu naznačili, uvedieme za niektorými kapitolami stručný prehľad „hlavných účinkujúcich“ a spomenieme niektoré závažné myšlienkové prúdy. Začneme podľa trochu jednotvárneho, ale pravdivého: „už starí Gréci...“

⁹ Ako jeden príklad za všetky spomeňme iba newtonovskú mechaniku a jej rozhodujúci vplyv na mechanistický materializmus v osvietenskom predrevolučnom 18. storočí vo Francúzsku

Eleati boli filozofi pomenovaní podľa gréckej kolónie Elea, kde pôsobili v 6. a 5. st. pred. n. l. (Teraz sa toto prístavné mesto v južnom Taliansku volá Castellamare della Bruca). Postrehli nedokonalosť zmyslového poznania a zdôraznili význam poznania rozumového. Prešli však do krajnosti tvrdením, že zmysly nás iba klamú. Najvýznamnejší predstaviteľ eleatskej školy *Parmenides*, ktorý žil na prelome 6. a 5. st., popieral existenciu rozumom nepostrehnuteľného „nebytia“, t. j. prázdna alebo vákua. Bez prázdneho priestoru nie je možný ani pohyb, ktorý je tiež iba zmyslovým klamom.

Parmenides napísal: „Nekrúť bez cieľa očami, nepočúvaj ušami, v ktorých sa rozlieha iba hluk a nemel' naprázdno ústami, ale rozumom skúmaj dôkaz, ktorý som vyslovil“.

Radikálnym zástancom tejto metodologickej smernice bol Parmenidov žiak *Zenón*. Obraňoval eleatské učenie dôkazmi o logickej spornosti tvrdení ich protivníkov. Podľa Zenóna, ak pustíme na zem jedno zrno, nepočujeme zvuk pri jeho dopade. Ale ak padne vreco obilia, počujeme hluk. Avšak rozum tvrdí: alebo pôsobí hluk aj jedno zrno, alebo ho nespôsobí ani vreco obilia. Ináč by sa súčet núl rovnal určitej kladnej veličine. Podľa Zenóna pohyb neexistuje, lebo vedie k sporom v myslení. Aby to dokázal, formuloval štyri „apórie“, dnes by sme povedali paradoxy. Tu pripomenieme čitateľovi najznámejšiu Zenónovu apóriu Achilles a korytnačka.

Achilles zaostáva za korytnačkou. Kým prebehne vzdialenosť, ktorá ich rozdeľuje, pohne sa korytnačka opäť o niečo vpred atď. Vzdialenosť medzi Achillom a korytnačkou sa bude síce skracovať, ale nikdy nebude nulová.

Zenónove apórie donucovali protivníkov hľadať logicky neprotirečivý pojmový aparát, pomocou ktorého by sa dala opísať zmyslami vnímaná skutočnosť. Konečné riešenie problému opisu pohybu prišlo oveľa, oveľa neskôr zavedením integrálneho a diferenciálneho počtu a pojmu rýchlosti a relatívnej rýchlosti. Ale toto by nás odvieďlo príďaleko.

Demokritos sa narodil asi v roku 460 pred n. l. v Abdére v Trákii. Na dnešných mapách Abdéru nenájdeme. Miesto, kde ležala, je teraz v Grécku, na severnom pobreží Egejského mora. V mladom veku precestoval Babylon, Perziu a Egypt, študoval v Aténach. „Zo všetkých svojich súčasníkov“ – písal – „prešiel som najväčšiu časť sveta. Konal som hlbšie výskumy než hocikto iný, videl som veľmi veľa podnebí a počul som veľmi mnoho učencov“. Bol prvým polyhistorom pred Aristotelom. Zaoberal sa prírodovedou, matematikou, astronómiou a jazykovedou, etikou, estetikou a hudbou. Podľa Aristotela: „... s výnimkou Demokrita nikto nič v ničom nezodôvodnil, iba ak nejakú povrchnosť. Len Demokritos, zdá sa, uvažoval o všetkom a vyznal sa vo všetkom“.

Umelecké majstrovstvo jeho písomného prejavu prirovnávali starí Gréci k Platónovi, ktorý bol jeho najväčším filozofickým protivníkom. V Demokritovej filozofii vyvrcholila materialistická línia predsokratikov, a to nielen v učení o atómoch, ako o hmotnom základe všetkého existujúceho, ale aj v chápaní prísnej príčinnosti v prírode a v náuke o poznaní. Podobne ako eleati považoval za pravdivé rozumové poznanie, ale svedectvo zmyslov nie je podľa Demokrita bezcenné, naopak, je prirodzeným overením našich tvrdení. V tomto smere ovplyvnila Demokritova filozofia vznik fyziky ako experimentálnej prírodovedy v histórii neskorej renesancie (v 16. a 17. storočí).

D. J. Struik a niektorí iní historici matematiky zdôrazňujú vplyv Demokrita na Archimeda, ktorého možno považovať za predchodcu integrálneho počtu, ba sledujú jeho vplyv až do čias, keď Newton a Leibniz vypracovali integrálny a diferenciálny počet. Demokritos pôsobil v Abdére a v Aténach, kde vytvoril školu atomistov. Dožil sa vysokého veku – 90 rokov, zomrel v roku 370 pred n. l.

Epikuros sa narodil r. 341 pred n. l. na ostrove Samos pri Malej Ázii v rodine dedinského učiteľa. Od štrnásteho roku života sa venoval vedám a filozofii, vzdelanie získal v Aténach a v rôznych maloázijských mestách. Študoval Platónovu filozofiu i Demokrita a priklonil sa jednoznačne k materializmu a atomizmu. (Karol Marx venoval svoju doktorskú dizertačnú prácu práve rozvinutiu Demokritovho atomizmu v Epikurových spisoch.) Ako tridsaťročný začal Epikuros prednášať filozofiu v Mytiléne na ostrove Lesbos v Egejskom mori a Lampsaku. Od r. 306 pôsobil v Aténach, kde založil svoju školu, v dejinách známu ako Epikurova záhrada. Zomrel v r. 270 pred n. l. v Aténach.

Hlavnú pozornosť venoval rozvíjaniu Demokritovho atomizmu a etike. Cieľom filozofie je podľa Epikura šťastie človeka a za najvyššie dobro pokladal blaženosť, slasť. V stredoveku ho označovali za hlásateľa neresti a materializmus stotožňovali s hriechnym požívačnosťou a prostopašnosťou. Ale šťastie nespočíva podľa Epikura v honbe za rozkošami, lež v oslobodení od utrpenia. Len dlhým štúdiom a úsilím môže sa stať človek múdрым a vytvoriť si šťastný a cnostný život. V jednom liste Epikuros napísal:

„Nie neustále hostiny a tancovačky, nie slasti s mladíkmi či ženami alebo vari pôžitky z rýb a všetkého, čo dáva prepychový stôl, z toho sa nerodí príjemný spôsob života. Ten sa rodí z múdrosti...“

Titus Lucretius Carus sa narodil pravdepodobne v roku 99 alebo 96 pred n. l. a zomrel v r. 55 alebo 54. Jeho báseň *De rerum natura* vydal Cicero z úcty k veľkému umelcovi, hoci s jeho filozofiou nesúhlasil. *De rerum natura* je epická báseň v šiestich knihách, napísaná v hexametroch. Je to výklad a obrana Epikurovej filozofie. Existujú tri české preklady, posledný z roku 1971.

Na tomto mieste citujeme z prvej knihy pasáž, v ktorej Lucretius popiera spojitosť hmoty a obraňuje jej atómovú štruktúru.

„Kdyby nebylo určité nejmenší části, mělo by každé tělísko bezpočet dílů, každý díl by se mohl rozdělit v půlky, ty zas v další, a nikdy by nebylo konce. Kde je pak rozdíl mezi velkým a malým? Nebude žádného: třebaže veškerý vesmír má bez počtu částí, přece by nejmenší díly měly zas nesčíslné částice vlastní. Tomu se protiví zdravý rozum a praví, že tomu věřiti nelze, proto se poddej a uznej jsoucnost dílů nedělitelných, velice malých. A jsou-li, musíš už uznat, že jsou nepropustné a trvají věčně“. (Preklad Julie Novákovéj, vydanie z r. 1945).

Robert Boyle a jeho úloha pri vzniku novodobej vedy

Pozorný čitateľ si v histórii atomizmu iste všimol poldruhatísročnú prestávku od Tita Lucretia Cara po Boyla a jeho súčasníkov. Isteže to neznamená, že celý ten čas vedecký vývin stagnoval. Nesporné však je, že od Konštantínových čias (r. 313) zasahovala svetská a duchovná moc do prírodovedeckého bádania. V stredoveku sa situácia ešte väčšmi vyhranila. Z dvoch myšlienkových prúdov, Demokritovho a Platónovho bolo dovolené nadviazať iba na druhý prúd. Tým sa vysvetľujú pokroky, ktoré mohli dosiahnuť učenici v stredoveku v astronómii a v matematike na jednej strane a stagnácia vo fyzike na druhej strane. Tomáš Akvinský (1225–1274) kánonizoval Aristotelov naivný fyzikálny obraz sveta, avšak Aristotelovu toleranciu k svojim filozofickým protivníkom a najmä jeho úctu k Demokritovi zavrhol a materialistov-atomistov zatratil.

Rozvoj astronómie a matematiky viedol napokon ku „kopernikovskému obratu“, k novému obrazu Slnecnej sústavy, ktorý dovŕšil Johannes Kepler. Kepler počas svojho pražského pobytu venoval úmorných päť rokov života výpočtom dráhy Marsu na základe pozorovaní Tycha Brahe. Johannes Kepler (1571–1630) pôsobil v Prahe v rokoch 1600–1612 a formuloval tam prvé dva zo svojich troch slávnych zákonov. Začiatkom 17. storočia sa začal aj veľký prevrat vo fyzikálnom myslení, ktorý je spojený s buričom a geniálnym mysliteľom Galileom Galileim (1564–1642).

Spoločensko-ekonomickým podnetom veľkého prelomu vo fyzikálnom myslení bol rozvoj manufaktúry a s ňou späté politické hnutia rodiaceho sa meštiactva, ktoré sa v tomto období spravidla končili kompromisom s kráľovskou mocou. Mešťiaci a čiastočne aj osvietení panovníci podporovali prírodovedecké – najmä mechanické bádanie, lebo im prinášalo hmotný osov a zvyšovalo lesk ich palácov a dvorov.

V mechanike začali byť aktuálne dynamické problémy v súvislosti s balistikou, keď sa strelný prach, ktorý objavili v Číne, začal v Európe využívať v delostrelectve. (Galileo Galilei prvý vyriešil problém šikmého vrhu!)

Vytvorili sa aj inštitucionálne predpoklady slobodného prírodovedeckého bádania. Ako protiklad k univerzitám, ktoré sa len pomaly oslobodzovali od neplodných scholastických dišpút, vznikali učené spoločnosti – akadémie. V Taliansku mali v období humanizmu, v 15. a 16. storočí, charakter literárnych spoločností – v neskorej renesancii sa orientovali na prírodné vedy a zaoberali sa výhradne experimentovaním a matematickou formuláciou prírodných zákonov. Galilei bol členom *Accademie dei Lincei*, založenej v r. 1601. Jej symbolom boli ostré oči rysa. 15 rokov po jeho smrti vznikla *Accademia del Cimento* – akadémia pokusu, ktorej deväť členov, Galileiho žiakov a nasledovníkov publikovalo výsledky spoločných experimentov.

Zo spoločnosti, ktorá sa schádzala od r. 1645 v Londýne, neskoršie v Oxforde v dome lekárniky Crossa (kde býval aj Robert Boyle) a napokon zase v Londýne, vznikla v roku 1662 anglická kráľovská spoločnosť – *Royal Society*. K dobrým mravom tejto spoločnosti patrilo predvádzanie experimentov na každom jej zasadaní. Isaac Newton tu dal predviesť v roku 1671 svoj zrkadlový ďalekohľad.

Fyzika sa konštituovala na vedu v čase, keď sa oslobodila od tvrdení stredovekej scholastiky, keď začala klásť prírode otázky pomocou experimentov a meraní a matematicky formulovala princípy a zákony, ktorých dôsledky museli byť experimentálne overené.

Renesancia slobodného antického bádateľského ducha, spojená s novým faktorom, ktorý starí Gréci podceňovali ba aj zaznávali totiž s experimentovaním – privodila aj renesanciu atomizmu. Aj keď atómy v tomto období zostali hypotetickými časticami, Demokritove pojmy prázdno a látka, ktorá pozostávala z čiastočiek, dostali oveľa realistickejšiu podobu. O obnovenie antického atomizmu sa zaslúžil francúzsky filozof Pierre Gassendi¹⁰ (1592–1655), ktorý ako matematik a astronóm ovplyvnil novovekých prírodovedcov. Galileiho žiak Evangelista Torricelli¹¹ (1608–1647) svojím slávnym pokusom dokázal, že žijeme na dne vzdušného oceánu, ktorý pôsobí na nás atmosférickým tlakom, a prvý experimentálne vyrobil vákuum (zvané Torricelliho vákuum). Francúzsky filozof a matematik Blaise Pascal (1623–1662) dokázal analógiu medzi zákonmi aerostatiky a hydrostatiky (tlak vzduchu s nadmorskou výškou klesá). Presvedčený zástanca atomizmu Otto von Guericke (1602–1686) ďalej experimentoval s Torricelliho barometrom a skonštruoval piestovú mechanickú vývevu.

V tejto situácii vstúpil na javisko dejín fyziky a chémie Robert Boyle. Narodil sa 25. januára 1627 v Lismore v Írsku ako siedmy a posledný syn britského šľachtica (Earl of Cork). Značný majetok použil na to, aby si zadovážil na tie časy náročnú experimentálnu aparaturu. Bádal na svojom statku, neskôr v Oxforde a v Londýne. Robert Hooke (1635–1703), známy zákonom rozťažnosti pružných telies, skonštruoval v roku 1658 pre Boyla vylepšenú piestovú vývevu. S touto pneumatickou mašinou vykonal Boyle sériu experimentov, niektoré v prítomnosti známeho architekta katedry sv. Pavla v Londýne Christophera Wrena (1632–1723) a matematika Johna Wallisa (1616–1703).¹² Týmito experimentmi potvrdil Boyle hypotézu Richarda Towneleya (1628–1707), podľa ktorej je tlak zriedeného plynu pri danej teplote nepriamo úmerný objemu. Zásluhu na formulovaní tohto zákona má aj Robert Hooke. Nezávisle od britských experimentátorov objavil túto závislosť francúzsky kňaz Edmé Mariotte (1620–1684), vo fyzike sa ustálil termín Boylov-Mariottov zákon. Svoje názory o časticovej štruktúre vzduchu a experimenty, potvrdzujúce tlak vzduchu, musel Boyle obraňovať proti zástancom teórií rôznych fluíd alebo mechanických blán, ktoré „vťahujú“ ortuť do Torricelliho trubice. Okrem „pružinovej teórie“, v ktorej prirovnal pružnosť vzduchu pružnosti špongie, spomína vo svojej knihe Nové fyzikálno-mechanické experimenty, týkajúce sa pružnosti vzduchu a jej efektov (Oxford 1660) ako možnú alternatívu aj Descartovu teóriu vzduchu, pozostávajúceho z častíc rôznej veľkosti, víriacich v kvapalnom éteri.

Roberta Boyla považujeme aj za zakladateľa modernej chémie. Zaviedol pojem chemického prvku ako látky, ktorú nemožno rozložiť. Odlíšil chemické zlúčeniny od zmesí a bol presvedčený, že proces zlučovania prvkov sa deje na atomárnej úrovni. Rozlišoval medzi atómami a molekulami, aj keď nepoužil tieto termíny a zaviedol pojem chemickej afinity.

Robert Boyle zomrel v Londýne 30. decembra 1691.

Isaac Newton sa narodil ako dieta roľníka (po otcovej smrti) 4. januára 1643 v dedine Woolsthorpe. Zomrel 31. marca 1727 v Kensingtone pri Londýne ako sir Isaac a prezident Royal Society. Pochovali ho s kráľovskými poctami vo Westminsterском opátstve v Londýne. Bol zakladateľom klasickej mechaniky, ktorej osnovu podal vo svojom vrcholnom diele Matematické princípy prírodnej filozofie. V piatej kapitole druhej knihy sa zaoberá tekutinami, t. j. „telesami, ktorých časti povolia každej pôsobiacej sile, a teda ľahko sa navzájom pohybujú“. Zaoberá sa pritom rôznymi hypotézami o druhu síl, ktoré pôsobia medzi atómami. Na Boylov zákon vedie jediný predpoklad, podľa ktorého medzi atómami pôsobí odpudivá sila, ktorá je nepriamo úmerná vzdialenosti medzi nimi.¹³ V 14. kapitole prvej knihy odvodzuje Newton zákon lomu a odrazu svetla na základe predpokladu, že svetlo pozostáva z malých teliesok, na ktoré pôsobia v hustejšom prostredí mechanické príťažlivé sily, ktoré sú kolmé na povrch telesa.

Newtonovu korpuskulárnu teóriu svetla prijímali fyzici až do polovice minulého storočia. Medzi jej zástancov patrila aj bratislavský rodák Ján Andrej Segner (1704–1777), objaviteľ Segnerovho kolesa, ktorý v roku 1740 ako profesor matematiky v Göttingene vypočítal medzery medzi molekulami svetla vo svetelnom lúči. Podľa Segnera by molekuly svetla spôsobili spojitý vnem na sietnici, aj keby boli navzájom veľmi vzdialené. K Newtonovým optickým prácam sa vrátíme v 2. a 4. kapitole.

¹⁰ Gassendiho stúpencom bol aj slovenský filozof Izák Caban (1632–1707).

¹¹ Podľa Torricelliho návodu prvý zo série pokusov s Torricelliho trubicou urobil jeho mladší druh Vincenzo Viviani (1622–1703).

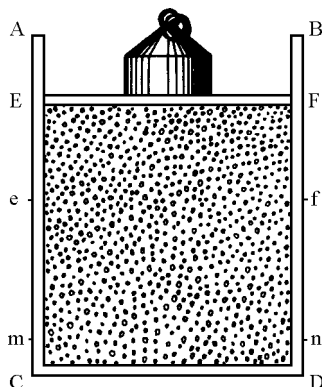
¹² Wren a Wallis nezávisle od Christiana Huygensa odvodili zákon zrazu tuhých pružných gúľ, ktorý neskôr J. C. Maxwell a L. Boltzmann využili v molekulárnokinetickú teóriu plynov.

¹³ § 32 II. knihy, V. kapitola

Daniel Bernoulli sa narodil 8. februára 1700 v Groningene v Holandsku. Jeho otec Johann a strýc Jakob založili dynastiu matematikov, ktorí pôsobili dve storočia prevažne vo Švajčiarsku.

Daniel Bernoulli bol od r. 1725 profesorom matematiky v Sankt-Peterburgu, od r. 1733 profesorom anatómie a botaniky a od r. 1750 profesorom fyziky v Bazileji. Tam aj zomrel 17. marca 1782.

Daniel Bernoulli je jedným zo zakladateľov hydrodynamiky. V roku 1738 vyšlo v Strasbourgu jeho dielo *Hydrodynamika* alebo komentáre o silách a pohyboch tekutín. Krátka desiaty kapitola tejto knihy má nadpis „O vlastnostiach a pohyboch pružných flúid, predovšetkým vzduchu“. V tom čase sa síce dávalo teplo do súvisu s pohybom molekúl, ale iba nepriamo¹⁴.



Obr. 1.1

Bernoulli prvý vyslovil myšlienku, že teplo nie je nič iné ako neusporiadaný pohyb molekúl. Tlak plynu vysvetlil nárazom molekúl na stenu nádoby. Ak sa plyn nachádza v nádobe tvaru valca (pozri obr. 1.1) s pohyblivým piestom, ktorý je zaťažený závažím, nastane rovnováha, keď stredná sila, ktorou pôsobia molekuly narážajúce na piest, bude vyvážená silou tiaže, ktorá pôsobí na piest so závažím. Bernoulli vypočítal túto strednú silu a ukázal, že pri konštantnej teplote je nepriamo úmerná objemu. Pri zmene teploty sa tiež mení tlak, a to priamo úmerne s druhou mocninou rýchlostí častíc. Bernoulli svojimi výpočtami o vyše sto rokov predbehol svoju dobu.

Michail Vasilievič Lomonosov sa narodil 19. novembra 1711 v Denisovke, v terajšom Lomonosove v Archangelskej oblasti. Študoval v Moskve, v Sankt-Peterburgu, v Marburgu a vo Freiburgu. Od r. 1745 bol akademikom Sankt-Petersburgskej akadémie. 14 rokov pred Lavoisierom (1756) dokázal, že pri chemických reakciách sa hmotnosť zachováva. Skonstruoval okolo 100 fyzikálnych a chemických prístrojov, napr. viskozimeter, pyrometer, plynový barometer a iné.

Lomonosov bol dôsledným atomistom, húževnate popieral existenciu rôznych nevážitelných látok, napríklad kalorika.

Lomonosov bol úspešne činný vo všetkých oblastiach chémie a fyziky svojho obdobia, menovite tiež v optike a v náuke o elektrine a magnetizme. Z jeho iniciatívy založili v r. 1755 univerzitu v Moskve (terajšia Lomonosovova univerzita). Zomrel 15. apríla 1765.

¹⁴ Napríklad Pierre Simon, marquis de Laplace (1749-1827) vo svojej slávnej *Nebeskej mechanike* (Paríž 1825) považoval teplo za akúsi nevážitelnú látku, nazvanú kalorikum. Podľa Laplacea je Newtonova odpudivá sila medzi molekulami úmerná druhej mocnine množstva kalorika, viazaného na každú molekulu. Dosť komplikovanými úvahami dospel z tohto predpokladu k stavovej rovnici ideálneho plynu.

2 AKÉ VEĽKÉ SÚ ATÓMY A Z ČOHO SA SKLADAJÚ

2.1 AVOGADROVA KONŠTANTA A VEĽKOSŤ ATÓMOV

Najprv sa vrátíme trochu podrobnejšie k zákonu o stálych hmotnostných pomeroch látok vstupujúcich do chemických reakcií, o ktorom sme už hovorili v úvode. Ďalej budeme hovoriť o tom, ako sa možno niečo dozvedieť o rozmeroch atómov a molekúl.

Pri zlučovaní kyslíka a uhlíka na oxid uhličitý (t. j. pri horení uhlíka) sa ukazuje, že na jednu hmotnostnú jednotku uhlíka pripadá asi 2,67 hmotnostnej jednotky kyslíka. Ak veríme v nejakú jednoduchú zákonitosť pri zlučovaní, môžeme napísať $1 : 2,67 \approx 3 : 8$ a vidíme, že na tri hmotnostné jednotky uhlíka pripadá 8 jednotiek kyslíka. Samotný údaj nám nehovorí nič o tom, koľko atómov kyslíka a uhlíka spolu vytvára molekulu, a preto ani o tom, aké sú relatívne hmotnosti oboch typov atómov. Ak ale pridáme k záveru, že molekula oxidu uhličitého by mala byť (v dnešnom zápise) CO_2 , vidíme, že pomer hmotnosti uhlíka m_C a hmotnosti atómu kyslíka m_O je

$$m_C : m_O = 3 : 8$$

Ak preskúmame veľa podobných reakcií a ako základ zoberieme hmotnosť najľahšieho atómu, t. j. atómu vodíka a označíme ju ako m_H , potom sa, povedzme, z pomerov pri zlučovaní vodíka a kyslíka na vodu a z informácie o tom, že molekula vody má štruktúru H_2O , môžeme dozvedieť, že $m_O : m_H \approx 16 : 1$. Z predchádzajúceho potom tiež vidno, že $m_C : m_H \approx 12 : 1$. Ako vidno, úloha nie je celkom triviálna ani v jednoduchých prípadoch. A navyše jestvujú aj netriviálne príklady. Ukazuje sa, že existujú reakcie, kde je ťažké zapísať hmotnostné pomery pomocou celých čísel tak, aby to súhlasilo so všetkým ostatným.

Napríklad zlučovanie sodíka a chlóru na kuchynskú soľ spolu s informáciou o tom, že $m_{\text{Na}} \approx 23 m_H$, by viedlo k tomu, že hmotnosť chlóru je okolo 34,45 m_H , čo je ďaleko od celého čísla¹⁵.

Zákon o stálych zlučovacích pomeroch takto podporoval atómovú hypotézu, ale mal aj svoje slabé miesta a nebol určite presvedčivým dôkazom o existencii atómov.

Navyše ostávala nerozriešenou otázka o skutočnej (a nie pomernej) hmotnosti atómov. Vieme, že veľmi tesne súvisí s otázkou veľkosti atómov. Keby sme napríklad vedeli, aký objem zaberá jeden atóm železa, a predpokladali, že v kove sú atómy natlačené tesne jeden vedľa druhého, mohli by sme zmerať, koľko atómov je v danom kúsku. Potom by sme už len predelili hmotnosť tohto kúska železa počtom atómov a vedeli by sme, aká je hmotnosť atómu.

Aj tu sa informácie zhromažďovali postupne a jednoduché experimenty sa dopĺňali smelými úvahami.

Odhad veľkosti atómov, či presnejšie molekúl možno získať pokusmi, ktoré robil už Franklin. 5 cm^3 oleja, vyliateho na pokojnú vodnú hladinu, sa roztečie po ploche okolo 0,2 hektára (1 hektár = 10 000 m^2). Predstavme si, že olej vytvorí rovnomernú vrstvu. Jej výšku odhadneme takto: 5 $\text{cm}^3 = 5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3$ je celkový objem oleja. Ak objem potom predelíme plochou, po ktorej je roztečený, dostaneme výšku vrstvy

$$h = \frac{5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3}{2 \cdot 10^3 \text{ m}^2} = 2,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}$$

Ak si predstavíme (a to je smelý predpoklad), že výška vrstvy je zhruba rovná veľkosti molekuly, máme veľmi približný odhad tejto veľkosti. Dnes už vieme, že molekuly oleja sú pomerne dlhé (s prihliadnutím na atómové rozmery) a výška olejovej vrstvy má rozmer niekoľkých molekulových dĺžok. Rozmery atómov sú potom niekoľkokrát 10^{-10} m .

¹⁵ Táto hádanka bola vyriešená až neskôr, keď sa ukázalo, že atómy chlóru sú dvoch typov: jeden typ má hmotnosť okolo 35 m_H a druhý približne 37 m_H . Chemicky sa odlišit' nedajú a v prírode sa vyskytujú v takom pomere, že priemerná hmotnosť atómu chlóru je 35,45 m_H (skúste odhadnúť tento pomer).

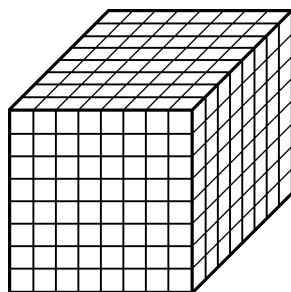
Iný jednoduchý odhad rozmeru molekuly možno dostať úvahou V. Weisskopfa. Nápad je z nedávnej minulosti, ale mohol vzniknúť oveľa skôr, a preto ho tu uvádzame. Základná myšlienka je takáto: predstavme si kocku vody s hranou 1 m. Celkový objem je teda $V = 1 \text{ m}^3$. Z experimentov vieme, že na vyparenie 1 kg vody potrebujeme energiu

$$E = 2,1 \cdot 10^6 \text{ J}$$

Z iných experimentov (kapilarita, nafukovanie mydlových bublín a pod.) vieme, že energia pripadajúca na jednotku povrchu vodnej hladiny je $\alpha = 72 \cdot 10^{-3} \text{ J/m}^2$. Ak chceme zväčšiť povrch kvapaliny, napríklad tak, že veľkú kvapku rozdelíme na menšie, potom na vytvorenie povrchu P budeme potrebovať energiu αP .

Predstavme si teraz molekuly vody ako malé kocky s hranou d tak, ako je to znázornené na obr. 2.1. Vyparovanie si predstavíme ako postupné rozoberanie veľkej kocky na malé „molekulárne“ kocky. Ak je veľká kocka rozobraná na malé, celkový povrch týchto malých kociek bude obrovský. Odhadnime ho! Celkový počet malých kociek s hranou d , ktoré takto vzniknú, je

$$n = \left(\frac{1 \text{ m}}{d} \right)^3$$



Obr. 2.1 Veľká kocka vody ako súbor „molekulárnych“ kociek

Povrch jednej kocky je $6d^2$ a celkový povrch bude

$$P = n \cdot 6d^2 = \left(\frac{1 \text{ m}}{d} \right)^3 6d^2 = \frac{6 \text{ m}^3}{d}$$

Energia potrebná na vytvorenie takéhoto povrchu je

$$E = P\alpha = \frac{6 \text{ m}^3}{d} \cdot \alpha$$

Ak je táto predstava aspoň približne správna, potom by táto energia mala byť približne rovnaká energii potrebnej na vyparenie 1 m^3 vody. Odtiaľ dostaneme

$$2,1 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{kg}} \cdot 10^3 \text{ kg} = \frac{6 \text{ m}^3}{d} \cdot 72 \cdot 10^{-3} \frac{\text{J}}{\text{m}^2} \quad (2.1)$$

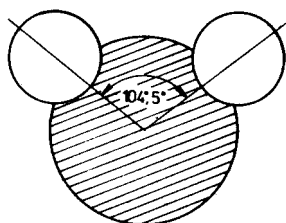
pričom na ľavej strane sme už využili aj to, že 1 m^3 vody má hmotnosť okolo 10^3 kg . Odtiaľto už ľahko nájdeme

$$d = 2,1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Na tomto odhade rozmeru molekuly vody je niečo krásne a niečo podozrivé. Krásne je, že sme odhadli veličinu zo sveta atómov len z makroskopických údajov, povrchového napätia a tepla potrebného na vyparovanie vody. Podozrivé je, že sme vychádzali z predstavy o molekule vody ako o malej kocke. Prečo by sme si ju nemohli radšej predstaviť ako teliesko iného tvaru? Nuž, keby sme to urobili, dostali by sme pre rozmer molekuly trochu inú číselnú hodnotu, ale rozmer molekuly by vyšiel opäť rádo 10^{-10} m . Úlohou tejto jednoduchej úvahy nie je, a ani nemôže byť nájdenie presnej hodnoty rozmeru

molekuly. Je to skôr typický kvalitatívny odhad, ktorý môže dať len veľmi približnú rádovú predstavu o rozmere molekuly, ale aj tá je cenná.

Historicky sa informácia o rozmeroch molekúl vytvárala najprv štúdiom vlastností zriedených plynov. Experimentom sa určili niektoré dôležité údaje, ako sú stredná voľná dráha (vzdialenosť medzi dvoma zrážkami molekuly plynu) zavedená teoreticky Clausiom, viskozita plynu a pod. a z týchto makroskopických údajov sa odhadli rozmery molekúl.



Obr. 2.2 Molekula vody H_2O . Šrafovaním je znázornený atóm kyslíka, dve „ušičky“ sú atómy vodíka

Neskôr sa objavovali nové a nové javy a metódy merania rozmerov atómov a molekúl sa zdokonaľovali. Dnes je azda najpresnejšou metódou určovania rozmeru atómov štúdiom rozptylu rýchlych elektrónov na atómoch. O molekule vody napríklad vieme, že jej tvar je zhruba taký ako na obr. 2.2. Ak molekuly vody „napcháme“ tesne vedľa seba, a každú z nich uzavrieme do kocky s hranou d , potom pre d je rozumné brať hodnotu $d = 3,1 \cdot 10^{-10}$ m, čo nie je tak ďaleko od predchádzajúceho približného odhadu.

Ak už raz poznáme rozmer molekuly vody, môžeme ľahko odhadnúť počet molekúl v jednom kilomóle. Jeden kilomól je toľko kilogramov, ako veľká je hmotnosť molekuly v atómových jednotkách. Pre H_2O je to $1 + 1 + 16 = 18$ kilogramov. Príslušný objem kilomólu vody je okolo 18 litrov $= 18 \cdot 10^{-3}$ m³. Počet molekúl v tomto objeme je

$$N_A = \frac{18 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3}{(3,1 \cdot 10^{-10} \text{ m})^3} \approx \frac{6 \cdot 10^{26}}{\text{kmol}}$$

Odtiaľ možno odhadnúť ľahko aj hmotnosť molekuly vody. Stačí predeliť 18 kg Avogadrovou konštantou a dostaneme

$$m_{\text{H}_2\text{O}} \approx \frac{18 \text{ kg}}{6 \cdot 10^{26}} \approx 3 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

Ak už z pravidiel o hmotnostných pomeroch pri zlučovaní vieme, že atóm kyslíka má 16-krát väčšiu hmotnosť ako atóm vodíka, môžeme odhadnúť aj hmotnosť atómu vodíka

$$m_{\text{H}} \approx \frac{1}{18} m_{\text{H}_2\text{O}} \approx 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Poznamenajme ešte, že historicky bola Avogadrova konštanta prvýkrát spoľahlivo určená inými metódami, ako tými, ktoré sme spomínali – ich podrobnejší opis by nám však zabral priveľa miesta.

2.2 ELEMENTÁRNY NÁBOJ, HMOTNOSŤ ELEKTRÓNU

Neskôr ešte budeme hovoriť podrobnejšie o tom, že atómy sa skladajú z kladne nabitých jadier a zo záporne nabitých elektrónov, pričom v „normálnej“ situácii je atóm neutrálny, súčet všetkých nábojov v atóme je nulový. Niekedy má ale atóm o jeden či dva elektróny viac alebo menej ako v „normálnom“ neutrálnom stave, a potom jeho celkový náboj už nie je nulový. Opísaná situácia je napríklad vo vodnom roztoku niektorých látok, kde sú atómy už nabité. Pri štúdiu elektrolýzy si Faraday v r. 1834 všimol, že na vylúčenie jedného kilomólu látky na jednej z elektród treba, aby roztokom pretiekol práve určitý náboj alebo jeho celočíselný násobok.

Ak máme napríklad roztok NaCl, na vylúčenie jedného kilomólu sodíka, t. j. 23 kg potrebujeme náboj 96 520 000 C, kde C označuje jeden coulomb (dnes používaná jednotka náboja).

Súčasný výklad tohto javu je veľmi jednoduchý. V roztoku stráca atóm sodíka jeden elektrón a vystupuje ako ión Na^+ . Každý takýto ión prinesie na elektródu jeden kladný elementárny náboj, ktorý označíme ako e . V jednom kilomóle je N_A (Avogadrova konštanta) takýchto iónov, a preto musí platiť

$$eN_A = 96\,520\,000\text{ C}$$

Ak za N_A dosadíme približnú hodnotu $N_A = 6 \cdot 10^{26}$, rýchlo dostaneme

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19}\text{ C}$$

V r. 1834, keď Faraday (1791–1867) urobil tento objav, sa existencia atómov chápala len ako zaujímavá hypotéza a plný význam Faradayovho výsledku bol docenený až oveľa neskôr.

Náboj jednotlivého elektrónu a jeho hmotnosť zmeral až oveľa neskôr, r. 1897, J. J. Thomson. Presnejšia hodnota náboja elektrónu pochádza z Millikanových pokusov z obdobia okolo r. 1911. Základná myšlienka jeho pokusov je jednoduchá. Predstavme si, že máme malú guľôčku oleja, ktorá sa vznáša medzi dvoma vodorovnými nabitými platňami. Medzi týmito platňami je elektrické pole s určitou intenzitou E . Ak má guľôčka náboj q , potom na ňu pôsobí sila qE . Urobme to tak, aby horná platňa mala záporný náboj a dolná kladný: potom pri kladnom náboji guľôčky bude na ňu pôsobiť elektrická sila smerom nahor. Okrem tejto sily na ňu ale pôsobí aj gravitačná sila. Jej veľkosť je mg , kde m je hmotnosť guľôčky a g je známe gravitačné zrýchlenie. Predstavme si ďalej, že intenzitu elektrického poľa medzi platňami vieme ľubovoľne meniť. Ak sa nám podarí nájsť rýchlo takú hodnotu E , aby sa nabitá guľôčka vznášala na jednom mieste, tak sa elektrická a gravitačná sila, ktoré na ňu pôsobia, práve vyrovnajú a máme

$$mg = qE$$

Gravitačné zrýchlenie je známe, E poznáme tiež a ak vieme určiť hmotnosť guľôčky (napríklad z jej polomeru určeného pozorovaním pod mikroskopom a zo známej hustoty), potom môžeme určiť aj náboj guľôčky q . Vzniká ešte otázka, ako zariadiť, aby guľôčka bola nabitá a nie neutrálna. Najjednoduchšie je osvetliť guľôčku ultrafialovým svetlom, ktoré z nej vyrazí jeden či viac elektrónov (a preto bude náboj guľôčky kladný).

Millikanove experimenty ukázali, že náboje nabitých guľôčok bývali vždy malým celočíselným násobkom elementárneho náboja $e = 1,602 \cdot 10^{-19}\text{ C}$. So zreteľom na to, že guľôčka bola nabitá preto, že jej chýbal jeden či niekoľko elektrónov, bolo takmer nevyhnutné dostať sa odtiaľ k záveru, že náboj elektrónu sa rovná práve tomuto číslu (ale so záporným znamienkom).

Presná hodnota náboja elektrónu umožnila aj spresniť jeho hmotnosť. Vtip je v tom, že v pokusoch, kde sa študuje pohyb zväzku elektrónov v elektrickom či magnetickom poli sa vlastne meria pomer náboja a hmotnosti elektrónu, t. j. e/m . Vidno to napr. z toho, že sila, pôsobiaca na časticu s nábojom q v elektrickom poli s intenzitou \mathbf{E} , je $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$. Podľa druhého Newtonovho zákona platí

$$m\mathbf{a} = q\mathbf{E}$$

a odtiaľ

$$\mathbf{a} = (q/m)\mathbf{E}$$

Zrýchlenie je teda závislé len od intenzity poľa a od pomeru (q/m) . Ak v experimente poznáme \mathbf{E} , odmeriame \mathbf{a} a poznáme q , môžeme už ľahko určiť hmotnosť častice m . Náboj elektrónu môžeme zobrať buď z Faradayových alebo z Millikanových experimentov a potom z pokusov so zväzkami elektrónov možno dostať

$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}\text{ kg}$$

(pričom sme uviedli už súčasnú hodnotu, ktorá je zaokrúhlená na jedno desatinné miesto).

Ak tento výsledok porovnáme s hmotnosťou atómu vodíka, ktorú sme už odhadli, vidíme, že

$$m_H \approx 1\,840\, m_e$$

teda, že najľahší z atómov je takmer 2 000-krát ťažší ako elektrón.

2.3 RUTHERFORDOV OBJAV ATÓMOVÉHO JADRA

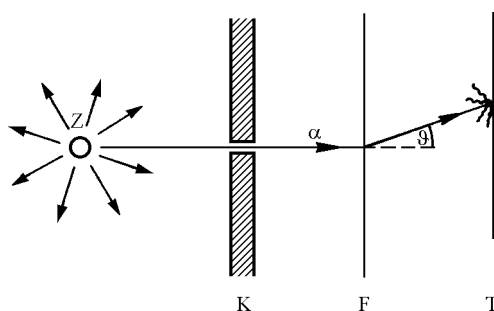
Z rôznych experimentov vznikla začiatkom nášho storočia asi takáto predstava o atómoch

- rozmer atómu je okolo 10^{-10} m,
- v atóme je kladný celkový náboj rovný Ze , kde Z je poradové číslo prvku v Mendelejevovej periodickej tabuľke a záporný náboj $Z(-e)$, rozdelený medzi Z elektrónov, z ktorých každý má náboj $(-e)$,
- prakticky celá hmotnosť atómu súvisí dajako s kladným nábojom, hmotnosť elektrónu je v porovnaní s hmotnosťou atómu veľmi malá, v atóme vodíka $m_e : m_H \approx 1 : 1840$.

Tieto poznatky sa fyzici snažili spojiť do nejakého jednotného obrazu či modelu a tak vznikol Thomsonov model alebo by sme vari mohli povedať Thomsonova predstava atómu. Podľa tejto predstavy je hmotnosť atómu, a s ňou aj celý kladný náboj, rozdelená spojitou a približne rovnomerne po celom objeme atómu. V tejto, tak trochu záhadnej látke, sa vznášajú malé a ľahké elektróny, ktoré sú držané v atóme príťažlivými silami pochádzajúcimi od kladného náboja.

Niektoré podrobnosti modelu ostávali nejasné – látka spojená s kladným nábojom musela byť napríklad ľahko priestupná, aby sa v nej elektróny mohli pomerne voľne pohybovať a vyžarovať alebo pohlcovať žiarenie dopadajúce na atóm. V tom čase už bolo totiž nazhromaždených veľa údajov o tom, ako atómy pohlcujú a vysielajú žiarenie, za čo mali byť prirodzene zodpovedné ľahké elektróny.

Thomsonova predstava o atóme nebola jedinou. Už koncom roku 1903 prišiel japonský fyzik Nagaoka s myšlienkou, že by kladný náboj mohol byť sústredený v malom objeme v strede jadra a elektróny by sa okolo neho pohybovali po kružniciach. Model bol ale hneď podrobený kritike, pretože elektróny pohybujúce sa okolo jadra by museli vyžarovať elektromagnetické vlny, strácať energiu a rýchlo spadnúť k ťažkému jadrú do stredu atómu. Otázky stability neboli celkom jasné ani v Thomsonovom modeli¹⁶, ale aj tak bol tento model najčastejšie používanou predstavou v čase (1908–1913) keď Rutherford so svojimi spolupracovníkmi Geigerom a Marsdenom začali so slávnymi experimentmi, ktoré zmenili našu predstavu o štruktúre atómu. Princíp experimentov je naznačený na obr. 2.3.

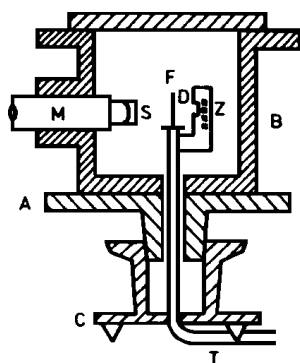


Obr. 2.3 Princíp experimentov Geigera a Marsdena, uskutočňovaných pod Rutherfordovým vedením. Z – zdroj α častíc, K – stena s malým otvorom (kolimátor), F – tenká zlatá fólia, T – tienidlo. Na obrázku je tiež uhol φ , o ktorý sa α častica odchýli od pôvodného smeru pri prechode fóliou

Zo zdroja Z (rádioaktívna látka) vyletujú všetkými smermi častice α . Prechodom niektorých z nich malým otvorom v stene K vzniká úzky zväzok dopadajúci na tenkú zlatú fóliu F . Pri prechode fóliou sa častice α odchýlia od pôvodného smeru a dopadajú na tienidlo T . Tienidlo je zhotovené z materiálu (napríklad sulfid zinočnatý), ktorý po dopade častice α vydáva záblesk. Nuž a záblesk už možno pozorovať voľným okom (ak je všetko naokolo zatemnené a oko sa už akomodovalo na tmu). Podľa tohto

¹⁶ Tento model sa niekedy nazýval aj „pudingovým modelom“, pričom vlastný puding zodpovedal spojitou rozloženému kladnému náboju a malé elektróny hrozičkám alebo čerešňiam. Dnes, keď už je štruktúra atómu dobre pochopená, by sme azda mohli mať sklon sa nad takýmito predstavami usmievať, ale bola by to veľká hlúposť. Nie je to tak dávno, čo sa v rokoch 1969–1970 objavili prvé údaje o štruktúre elementárnych častíc, ktoré naznačovali, že aj protón sa skladá z akýchsi „zrníčok“, ktorých rozmer bol oveľa menší ako rozmer samotného protónu. A prvé modely štruktúry protónu tiež vychádzali z jednoduchých takmer „pudingových“ predstáv. Thomsonov model sa v Anglicku nazýval pudingový, myslí sa tu ale „plum pudding“ čo je oficiálne prekladané ako hrozičkový puding, ale môže to znamenať aj koláč s hrozičkami. Jazykové jemnosti nás ale netrápia – dôvod pomenovania je beztak jasný.

princípu sa rozptyl častíc α pri prechode cez tenkú zlatú fóliu študoval na viacerých experimentálnych zariadeniach. Posledné zariadenie¹⁷ je na obr. 2.4.



Obr. 2.4 Experimentálne zariadenie Geigera a Marsdena z r. 1911. A – kruhová základňa, B – valcová kovová komora, C – stojan, D – otvor na vymedzenie lúča a častíc, F – fólia na ktorej sa α častice rozptyľujú, M – mikroskop, S – scintilačná obrazovka zo sulfidu zinočnatého, T – trubica, ktorou sa zo zariadenia vysával vzduch, Z – zdroj α častíc. Zdroj bol pripevnený na trubici T

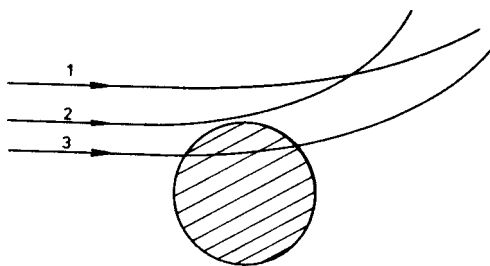
Výsledky boli skutočne prevrpením. Rutherford si neskôr na najdramatickejšie chvíle spomínal takto¹⁸: „Raz ku mne prišiel veľmi vzrušený Geiger a vraví: Zdá sa, že sme videli niekoľko prípadov rozptylu častice α dozadu. Toto je najnepravdepodobnejšia udalosť v celom mojom živote. Je to takmer tak málo pravdepodobné, ako keby ste 15-palcovým delostreleckým nábojom strieľali do tenkého cigaretového papiera a náboj by sa od papiera odrazil dozadu a vletel rovno do vás. Keď sme to všetko analyzovali, pochopil som, že takýto rozptyl dozadu musí byť výsledkom jedinej zrážky a po príslušných výpočtoch som videl, že to nie je možné inak, iba ak predpokladáme, že prevažná väčšina hmotnosti atómu je sústredená v maličkom jadre, zaberajúcom iba omrvinku z celého objemu atómu. Práve vtedy sa vo mne zrodila myšlienka o atóme s maličkým jadrom, v ktorom je sústredený celý kladný náboj atómu“.

V tomto krátkom úryvku je skrytá celá podstata problému. Pozrime sa preto najprv na to, prečo sa Rutherford čudoval. Zo svojich predchádzajúcich pokusov dobre vedel, čo sú to častice α . Sú to atómy hélia zbavené elektrónov, ich náboj je $+2e$ a ich hmotnosť je približne rovná štvornásobku hmotnosti atómu vodíka. Preto sú častice α zhruba 8 000-krát ťažšie ako elektróny a ľahké elektróny nemôžu ich pohyb ovplyvniť. (Situácia je tu rovnaká, ako keď ťažká olovená guľa prelieta „kŕdľom“ stolnotenisových loptičiek.) Preto je pre odklonenie častíc a podstatný len kladný náboj atómu. Predstavme si teda, že tento kladný náboj je rovnomerne rozložený v guli s polomerom R a pozrime sa, ako by sa častica α na takomto rozložení náboja rozptyľovala. Pritom si treba ale uvedomiť, že atóm zlata je v porovnaní s časticou α veľmi ťažký – jeho hmotnosť je približne 197-krát väčšia ako hmotnosť atómu vodíka a teda asi 50-krát väčšia ako hmotnosť častice α . Môžeme si preto predstaviť, že atóm zlata sa pri prechode častice α nepohne a ostane na pôvodnom mieste. Na druhej strane sa v atóme môžu voľne pohybovať elektróny, a preto sa dá očakávať, že častica α bude tiež môcť týmto rozložením náboja preniknúť.

Pozrime sa teraz na to, kedy sa častica a najviac odkloní od pôvodného smeru. Na obr. 2.5 sme nakreslili tri trajektórie častíc α aj ich odklon. Nakreslili sme to tak, že najviac sa odkláňa trajektória 2, pri ktorej častica α prechádza tesne pri povrchu rozloženia kladného náboja. Je prirodzené, že pri trajektórii 1 sa častica α odkloní od pôvodného smeru menej, lebo sa pohybuje ďalej od kladného náboja a elektrostatická sila, ktorá na ňu pôsobí, bude menšia ako na trajektórii 2. Prečo sa ale odklonila o menej aj častica prechádzajúca vnútri kladného náboja? Vtip je v tom, že keď je častica α vnútri oblasti s kladným nábojom, bude na ňu časť náboja pôsobiť smerom hore (na obr. 2.5) a časť náboja ju bude odpudzovať dolu. Obe sily sa čiastočne zrušia a výsledný odklon častice α od pôvodného smeru bude menší ako u častice, ktorá sa iba dotkne oblasti s kladným nábojom.

¹⁷ Obrázok pochádza z článku Geigera a Marsdena, ktorý bol publikovaný v časopise The Philosophical Magazine v roku 1913 (zväzok 25, str. 607). Citujeme ho tu podľa peknej knižky G. Triggga: Crucial experiments in Modern Physics (vydal van Nostrand r. 1971).

¹⁸ Voľne citované podľa Triggovej knižky.



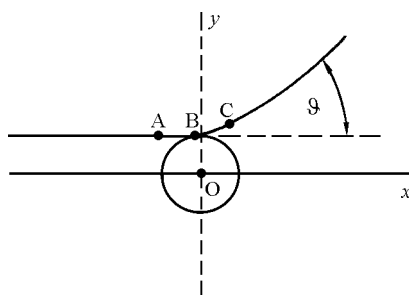
Obr. 2.5 Schematické znázornenie rozptylu častice α na kladnom náboji rozloženom na guľi s polomerom R

Podme teraz odhadnúť uhol, o ktorý sa odkloní častica a prechádzajúca v tesnom okolí guľe s kladným nábojom. Nebudeme robiť podrobný výpočet – ten by bol príliš náročný – ale spravíme skutočne len veľmi približný odhad. Situácia je znázornená na obr. 2.6.

Sila medzi kladným nábojom atómu a časticou α je odpudivá, lebo obe majú kladný náboj a je daná Coulombovým zákonom

$$F = K \frac{(2e)(Ze)}{r^2}$$

kde r je vzdialenosť častice a od stredu atómu, $2e$ – náboj častice α , (Ze) – kladný náboj jadra. Konštanta $K = 9 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2\text{C}^{-2}$, $Z = 79$ (pre zlato), $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, hmotnosť častice α je približne $m = 6 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ a typická rýchlosť, ktorou sa častica a v týchto experimentoch pohybovala, je $v \approx 3 \cdot 10^7 \text{ ms}^{-1}$.



Obr. 2.6 Pohyb častice α v blízkosti jadra pre trajektóriu, ktorá vedie k najväčšiemu uhlu rozptylu. Vzdialenosť OB sa rovná polomeru guľe s kladným nábojom, vzdialenosti AB , BC sú tiež zhruba rovné tomuto polomeru

Kým sa častica α priblíži k bodu A (pozri obr. 2.6), coulombovská sila, ktorá má smer od bodu O k okamžitej polohe častice α , bude túto časticu prevažne brzdiť, ale vychýľovať ju bude iba málo. Pri pohybe medzi bodmi A , C bude sila takmer kolmá na trajektóriu častice a práve na tomto úseku sa častica najviac vychýli od pôvodného smeru. Budeme pre zjednodušenie predpokladať, že sila je tu kolmá na trajektóriu častice. Jej veľkosť je približne

$$F = K \frac{2Ze^2}{R^2}$$

Vzdialenosť medzi bodmi A , C preletí častica za čas

$$\Delta t = \frac{AB + BC}{v} \approx \frac{2R}{v}$$

kde v je rýchlosť častice α .

Celkový impulz sily bude mať približne smer osi y a jeho veľkosť bude

$$F\Delta t = K \frac{2Ze^2}{R^2} \cdot \frac{2R}{v}$$

Tento impulz udelí častici α v smere osi y hybnosť

$$p_y \approx F\Delta t = K \frac{4Ze^2}{Rv} = mv_y$$

Pri pohybe za bodom C bude sila urýchľovať časticu α , ale bude už len málo meniť smer jej pohybu. Pôvodná hybnosť častice α bola mv a mala smer osi x . Nový smer pohybu bude spĺňať podmienku

$$\sin \vartheta = \frac{v_y}{v} = \frac{p_y}{mv} = K \frac{4Ze^2}{Rv} \quad (1^*)$$

Výsledok je zaujímavý tým, že jasne ukazuje závislosť od R (čím je R väčšie, tým je uhol odklonu menší).

V experimentoch Rutherforda, Geigera a Marsdena vyletovali častice s uhlami menšími ako zhruba 60° . Ak za ϑ dosadíme týchto 60° a za ostatné veličiny uvedené hodnoty, dostaneme pre R približne

$$R \approx 10^{-14} \text{ m}$$

Pretože rozmery atómu sú okolo 10^{-10} m, vidno, že rozmer oblasti, v ktorej je sústredený celý kladný náboj atómu, je len okolo 1/10 000 z celkového rozmeru atómu. Túto oblasť je prirodzené nazvať jadrom.

Vráťme sa ešte na chvíľu k vzťahu (1*). Tento vzťah pre maximálny uhol odklonu nie je presný, ale na orientáciu v experimentálnych údajoch je vhodný. Podstatné je ale to, že keby sme za R zobrali celý polomer atómu, dostali by sme pre typický odklon častíc a rádovo 1/100 stupňa, a to je tiež odklon, ktorý by odpovedal „15 palcovému delostreleckému náboju, prenikajúcemu cez cigaretový papierik“. Preto bol Rutherford prekvapený, keď počul od Geigera, že niektoré častice α sa odkláňajú na niekoľko desiatok stupňov. Celkom „dozadu“ sa odkláňalo len veľmi-veľmi málo častíc, podstatné však bolo, že pomerne veľa častíc sa odchyľovalo o veľké uhly. A slovo „pomerne“ treba zdôrazniť – bolo ich veľa so zreteľom na to, čo by sme očakávali pri spojitom rozložení náboja v jadre. Podrobná analýza experimentálnych výsledkov si vyžiadala veľa práce, ale jej celkovým záverom bol skutočne objav atómového jadra – experimenty ukázali, že jeho polomer musí byť menší ako 10^{-14} m:

2.4 ŽIARENIE ZAHRIATYCH TELIES A FOTOELEKTRICKÝ JAV, OBJAV ELEMENTARNEHO KVANTA ENERGIE

V prvej polovici 19. storočia bola v mnohých pekných a presvedčivých experimentoch dokázaná interferencia svetelných lúčov. Odtiaľ vyplývalo, že svetlo je vlnový proces. Ďalším krokom vpred – a to jedným z najväčších aké fyzika urobila – bolo zhrnutie všetkých elektrických a magnetických javov v Maxwellovej teórii elektromagnetického poľa. Maxwellova teória zahŕňa vlastne aj optické javy, lebo svetlo sa ukázalo len ako špeciálny prípad elektromagnetického žiarenia a vlnové dĺžky viditeľného svetla sú medzi 760 nm (červený koniec viditeľného svetla) a 380 nm (fialový koniec). Pritom 1 nm (nanometer) je 10^{-9} m a predtým sa používala aj jednotka 1 Å (angström), ktorá sa rovná 10^{-10} m.

Až na prelome 19. a 20. storočia sa ukázalo, že elektromagnetické žiarenie sa správa v istých situáciách „kvantovane“.

Vývoj predstavy o kvante svetla sa dá rozdeliť do troch etáp:

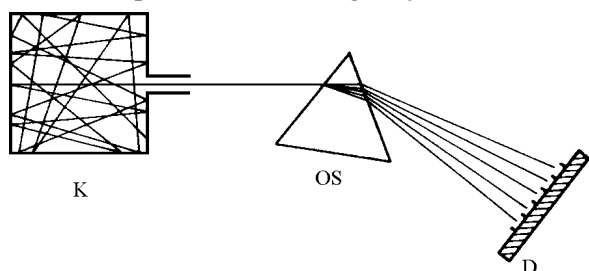
1. *Okolo r. 1900. Analýza žiarenia zahriatych telies a Planckova kvantová hypotéza.* Hypotéza, hoci viedla k úplne presnému súhlasu s experimentom, bola prijatá prinajmenšom rozpačito a s istou nedôverou.

2. *Rok 1905. Einsteinova analýza fotoelektrického javu.* Jav bol jednoduchší ako žiarenie zahriatych telies a kvantový charakter žiarenia bol záverom, ktorému sa dalo ťažko vyhnúť.

3. *Dvadsiate roky.* Pri rozptyle jednotlivých kvánt svetla na elektrónoch sa plne potvrdili zákony zachovania energie a hybnosti. Po tomto experimente (*Comptonov jav*) neostali už nijaké pochybnosti o kvantovom charaktere žiarenia.

História nechodia priamymi cestami a v prípade objavenia kvanta energie je to určite pravda. Z troch spomínaných skupín experimentálnych výsledkov je určite najzložitejší ten prvý. Preto si o ňom, povieme len veľmi málo a podrobnejšie si všimneme až ďalšie dva.

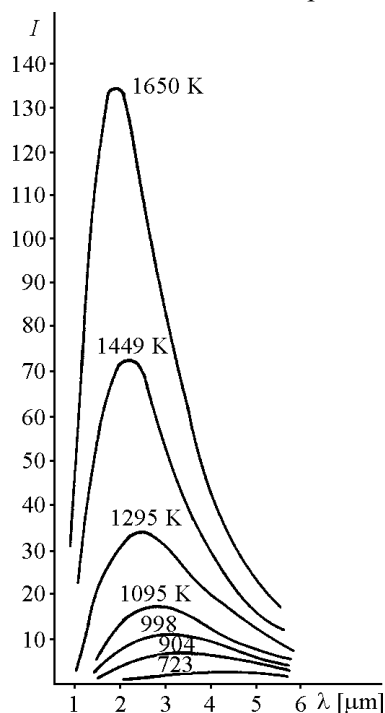
Rozhodujúce, presné experimenty o žiarení vysielanom zahriatymi telesami uskutočnili v ostatných rokoch deväťnásteho storočia Lummer a Pringsheim a v roku 1900 Kurlbaum a Rubens. Jav, ktorý študovali, je dobre známy z videnia alebo z počutia. Ak riadne zakúrime v starej dobrej peci so železnými dvierkami, po čase uvidíme, že dvierka sa rozpália do červena a keby sme kúrili ešte oveľa viac, videli by sme, ako farba dvierok prechádza do oranžovej, žltej a napokon bielej. V obyčajných peciach sa až tak nekúri, ale vo vysokých peciach sa dosahujú aj také vysoké teploty. Ak je svetlo červené, znamená to, že väčšina energie žiarenia pripadá na dĺžky vln, ktoré zodpovedajú červenému koncu spektra (okolo 760 nm) a ako farba postupne prechádza k bielej, maximum vyžarovanej energie sa presúva ku kratším vlnovým dĺžkam. Základná myšlienka experimentov Lummera a Pringsheima je znázornená na obr. 2.7. V skutočnosti boli veci oveľa zložitejšie a experiment bol tak, ako je to vždy s dobrými experimentmi, malým a dobre premysleným umeleckým dielom. Predovšetkým bolo treba zabezpečiť, aby skrinka bola zahriata rovnomerne na presne určenú a odmeranú teplotu, bolo treba vziať do úvahy pohlcovanie žiarenia vo vzduchu (a toto pohlcovanie nie je úplne rovnaké pri rôznych vlnových dĺžkach) a ďalej bolo treba presne merať energiu vyžiarenú v oblasti jednotlivých vlnových dĺžok.



Obr. 2.7 Zjednodušená schéma pokusov Lummera a Pringsheima. K – kovová skrinka s malým otvorom zahrievaná na teplotu T , OS – optická sústava, rozkladajúca žiarenie vychádzajúce z dutiny, D – „detektor“ určujúci vyžiarenú energiu pripadajúcu na jednotlivé vlnové dĺžky. Čiarky vnútri skrinky označujú žiarenie, ktoré sa odráža od stien a časť z neho vychádza otvorom zo skrinky

Po vyriešení všetkých uvedených problémov Lummer a Pringsheim dostali krivky znázornené na obr. 2.8. Úlohou teórie bolo vysvetliť tieto krivky. Experimentátori zariadili, že otvor v skrinke bol veľmi malý, takže nenarušal rovnováhu medzi žiarením a stenami pecky. Vychádzajúce žiarenie takto priamo dávalo informáciu o žiarení v skrinke, teda aj o tom, ako je rozdelená energia žiarenia na jednotlivé vlnové dĺžky. Ak sa toto žiarenie nachádza v rovnováhe s telesom zahriatym na teplotu T – mohli by sme tiež priamo povedať, že žiarenie má teplotu T .

Ani cesty teoretického chápania experimentálnych výsledkov nie sú priamočiare a v prípade žiarenia zahriatych telies bola cesta osobitne kľukatá a nebudeme sa pokúšať ju tu sledovať. Spomenieme z nej len tri momenty. V r. 1900 Max Planck najprv našiel formulku, ktorá veľmi dobre opisovala experimentálne údaje Lummera a Pringsheima, o ktorých sme už hovorili. Túto formulku v októbri r. 1900 potom „vylepšil“, ako sám hovoril, na základe experimentálnych údajov Rubensa a Kurlbauma, ktorí zmerali spektrálnu hustotu energie dutinového žiarenia v infračervenej oblasti pri väčších vlnových dĺžkach. „Vylepšená“ formulka veľmi dobre súhlasila s experimentálnymi údajmi v oblasti dlhých aj krátkych vln, nebola však hlbšie teoreticky zdôvodnená. O dva mesiace neskôr objavil aj teoretické zdôvodnenie svojho výsledku.



Obr. 2.8 Experimentálne výsledky Lummera a Pringsheima z r. 1899. Na osi x je vlnová dĺžka v μm (mikrometroch) na osi y intenzita žiarenia (v relatívnych jednotkách) pripadajúca na túto vlnovú dĺžku pri danej teplote. Pri jednotlivých krivkách je pripísaná príslušná teplota v Kelvinovej stupnici

Planck pri jeho odvodení predpokladal, že žiarenie je v tepelnej rovnováhe so stenami kovovej skrinky a pre jednoduchosť si predstavil, že steny skrinky sa skladajú z oscilátorov, ktoré pohlcujú a vysielaajú žiarenie¹⁹. Jednotlivé oscilátory kmitali s rôznymi uhlovými frekvenciami ω . Súhlas s experimentom dostal vtedy, keď predpokladal, že oscilátor kmitajúci s uhlovou frekvenciou²⁰ ω môže mať len diskrétné hodnoty energie rovné celočíselnému násobku výrazu $\hbar\omega$, kde \hbar je nová fundamentálna konštanta prírody

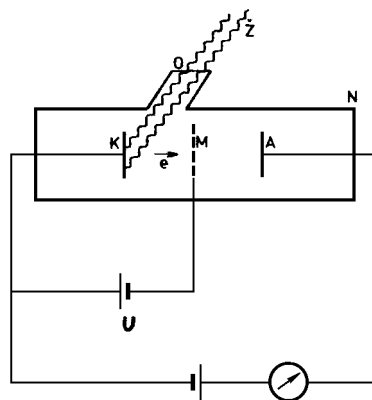
$$\hbar = 1,053 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Ďalším krokom v tomto smere bola analýza žiarenia vnútri dutiny už bez ohľadu na vlastný proces vyžarovania a pohlcovania svetla stenami dutiny. Celé žiarenie si totiž môžeme predstaviť ako skladajúce sa z mnohých rovinných vln, z ktorých každá má určitú uhlovú frekvenciu ω . Ak predpokladáme, že jej energia môže byť len celočíselným násobkom výrazu $\hbar\omega$, dostaneme tiež Planckov vzťah, ktorý je v úplnom súhlase s experimentom.

Einsteinova analýza fotoelektrického javu

Planckova kvantová hypotéza bola sprvu prijímaná s istým podozrením. Malo to viacero dobrých dôvodov. Po prvé, fyzici dobre cítili, že kvantovanie energie je niečím, čo sa zásadne protiví duchu a princípom klasickej newtonovskej fyziky. Po druhé, všetci si uvedomovali, že to, čo sa analyzuje, je komplikovaný jav, kde sú v hre steny nádoby, samotné žiarenie, komplikované vzájomné pôsobenie medzi žiarením a stenami nádoby – a o tom všetkom prináša žiarenie vychádzajúce z nádoby iba „súhrnnú“ informáciu. Napokon – a to je tretí a skôr psychologický dôvod – fyzikálna verejnosť má istý zdravý konzervativizmus, ktorý uprednostňuje vysvetlenie nového javu pomocou známych princípov pred vysvetlením vymysleným pre každý nový jav. Tento konzervativizmus má aj svoju pozitívnu stránku – vedie k tomu, že mnohé prírodné javy sú vysvetľované pomocou malého počtu základných princípov.

Aby bola kvantová hypotéza uznaná za nevyhnutnosť, bolo treba „vidieť v akcii“ individuálne kvantum energie. Toto priniesla Einsteinova analýza fotoelektrického javu.



Obr. 2.9 Princíp zariadenia na štúdium fotoelektrického javu: N – sklenená nádoba s vyčerpaným vzduchom, O – sludové okienko, ktorým vchádza ultrafialové žiarenie Ž, K – katóda, A – anóda, e – elektrón vyrazený z katódy, M – mriežka, ktorá pomocou regulovateľného napätia U brzdí elektróny vyrazené žiarením z katódy

Jav pozoroval už v r. 1887 H. Hertz a neskoršie podrobné merania uskutočnil P. Lenard²¹. Princíp experimentálneho zariadenia je na obr. 2.9. Na katódu K dopadá cez okienko O ultrafialové žiarenie.

¹⁹ Táto predstava bola skutočne oprávnená, lebo Kirchhoff už skôr ukázal, že vlastnosti tepelného žiarenia nezávisia od štruktúry látky, z ktorej sú steny dutiny. Preto si ich môžeme predstaviť ako sústavu oscilátorov. Aj k tejto predstave sa Planck prepracoval iba postupne. Spočiatku sa zaoberal jediným oscilátorom, ktorý pohlcuje a vysiela žiarenie, potom uvažoval veľký počet oscilátorov. Odtiaľ už je iba krok k predstave, že steny dutiny pozostávajú z kmitajúcich oscilátorov.

²⁰ Ako je známe, výchylka harmonického oscilátora z rovnovážnej polohy závisí od času podľa vzťahu $x(t) = x_0 \sin(\omega t + \alpha)$. Ak v čase $t = 0$ oscilátor práve prechádza rovnovážnou polohou, máme $x(t) = x_0 \sin(\omega t)$. Veličinu ω nazývame uhlovou frekvenciou alebo uhlovou rýchlosťou. Niekedy píšeme $\omega = 2\pi\nu$ a máme $x(t) = x_0 \sin(2\pi\nu t)$. Ak sa t zmení o $T = 1/\nu$, oscilátor sa práve vráti do pôvodnej polohy. T je perióda a ν frekvencia oscilátora.

²¹ P. E. A. Lenard bol bratislavským rodákom a za svoje výsledky vo fyzike si určite zaslúžil, že po ňom bola pomenovaná jedna z bratislavských ulíc. Bohužiaľ sa venoval nielen fyzike, ale aj politike – zúčastnil sa napríklad na kampani proti Einsteinovi a proti teórii relativity

Pod jeho účinkom z katódy vyletujú elektróny, ktoré dopadajú na anódu A . Elektróny možno brzdiť priloženým napätím U a ich energiu možno určiť zo závislosti prúdu od brzdiaceho napätia U .

Lenardove pokusy ukázali, že²²

– pri monochromatickom svetle dopadajúcom na katódu, majú všetky elektróny uvoľnené z katódy rovnakú energiu,

– pri zvyšovaní intenzity dopadajúceho svetla sa nemení energia elektrónov uvoľnených z katódy, ale rastie ich počet,

– energia elektrónov uvoľnených z katódy závisí iba od vlnovej dĺžky dopadajúceho svetla. Čím je vlnová dĺžka tohto svetla kratšia, tým majú elektróny väčšiu energiu.

V rámci klasických predstáv o vzájomnom pôsobení elektromagnetického vlnenia a elektrónov v kove nebolo možné tieto výsledky, prirodzene, vysvetliť. Einstein však podal veľmi jednoduché vysvetlenie, ktoré nadviazalo na Planckovu kvantovú hypotézu. Podľa neho monochromatické svetlo²³, t. j. elektromagnetická vlna s uhlovou frekvenciou ω , sa skladá z jednotlivých energetických kvánt a pohlcuje sa po jednotlivých kvantách, pričom každé z nich má energiu $\hbar\omega$. Pritom jedno takéto kvantum je pohltené jediným elektrónom materiálu katódy. Elektrón takto nadobudne energiu $\hbar\omega$. Časť z nej spotrebuje na to, aby sa uvoľnil z kovu (výstupná práca) a časť mu ostane ako kinetická energia. Ak to zapíšeme rovnicou, máme

$$\hbar\omega = \varphi + \frac{1}{2}mv^2$$

kde φ je výstupná práca, $mv^2/2$ – kinetická energia elektrónu s obvyklým označením jednotlivých veličín.

Tento Einsteinov vzťah vysvetľuje všetky tri základné črty spomínaných experimentálnych výsledkov. Hneď vidno, že energia vyrazeného elektrónu nezávisí od intenzity dopadajúceho svetla, ale len od jeho uhlovej frekvencie ω . A pretože $\omega = 2\pi c/\lambda$ vidíme, že s klesajúcou vlnovou dĺžkou svetla bude energia elektrónu rásť.

Ak v experimentoch meriame ω a energiu vyrazených elektrónov, potom z výsledkov získaných pri niekoľkých hodnotách ω môžeme určiť hodnotu Planckovej konštanty \hbar . Experimenty dávajú tú istú hodnotu \hbar , aká sa získala z analýzy žiarenia zahriatych „dutín“²⁴.

Z hľadiska dejinnej následnosti by sme teraz mali spomenúť čiarový charakter atómových spektier a jeho vysvetlenie Nielsom Bohrom v r. 1913 a experimentálne potvrdenie pokusmi Francka a Hertza. Týmto otázkam však venujeme ďalšie tri články. V tomto článku spomenieme ďalší jav, ktorý svedčí

v dvadsiatych rokoch a táto kampaň mala aj silný rasový podtón. A nebola to jeho jediná činnosť tohto typu. A tak napokon o ulicu prišiel. Škoda, že činnosť človeka nemožno rozdeliť na niekoľko častí a každú z nich posudzovať nezávisle od ostatných.

²² Tu trochu preháname. Hertzove a Lenardove pokusy neboli dostatočne presné na to, aby presvedčivo dokázali nasledujúce závery. Einstein prišiel s novým pohľadom na povahu svetla a po tom, čo sa týmto pohľadom fyzici pozreli na výsledky Hertza a Lenarda, bolo jasné, čo výsledky hovoria. Skutočne presné merania pochádzajú od Millikana a čitateľ sa s nimi môže stretnúť v jednom z príkladov v 8. článku tejto kapitoly.

²³ Monochromatickú vlnu, postupujúcu v smere osi z matematicky opisuje výraz

$$y(z, t) = A \sin\left(2\pi \frac{z}{\lambda} - 2\pi \frac{t}{T}\right)$$

kde $y(z, t)$ je výchylka vlniaceho sa prostredia z rovnovážnej polohy.

Ak uvažujeme vlnu pri danom pevnom čase t , potom máme periodickú funkciu v súradnici z a jej perióda je práve rovná dĺžke vlny λ . Ak naopak, uvažujeme určité pevné z , potom máme v tomto mieste proces, ktorý má v čase periódu T . Výraz $2\pi/\lambda$ označujeme ako k a nazývame ho vlnovým vektorom (pripisujeme mu smer, v ktorom sa vlna šíri – v našom prípade smer osi z). Výraz $2\pi/T$ označujeme ako ω a nazývame ho uhlovou frekvenciou. Ak sa zaujímate o to, akou rýchlosťou sa vlna šíri v priestore, musíme nájsť, ako sa „pohybuje“ miesto, v ktorom má argument sínusu určitú hodnotu. Pre jednoduchosť zoberieme

$$2\pi \frac{z}{\lambda} - 2\pi \frac{t}{T} = 0$$

a odtiaľ máme

$$\frac{z}{\lambda} = \frac{t}{T} = c$$

kde c je rýchlosť vlnenia (u nás rýchlosť svetla). Pomocou veličín k , ω máme

$$\omega = kc$$

²⁴ Poznamenajme ešte, že podrobná teória fotoelektrického javu vznikla až v rámci novej kvantovej teórie. Významným príspevkom k tejto teórii sú aj práce martinského rodáka Jána Fischera (1905–1980), profesora teoretickej fyziky Univerzity Komenského. Tieto práce boli napísané začiatkom tridsiatych rokov v Zürichu, kde Fischer pracoval u prof. G. Wentzela (ako štipendista Matice Slovenskej).

o kvantovom charaktere vzájomného pôsobenia elektromagnetického žiarenia a elektrónov. Je to Comptonov jav.

Comptonov jav bol objavený v čase, keď už o kvantových vlastnostiach žiarenia málokto z dobre informovaných fyzikov pochyboval. Ale je takým jasným dôkazom týchto vlastností, že ho predsa len spomenieme. V roku 1922 študoval A. Compton rozptyl röntgenového žiarenia na parafíne, uhlíku i ďalších materiáloch. Výsledky ukázali, že pri rozptyle sa mení vlnová dĺžka aj frekvencia žiarenia. Z hľadiska klasickej fyziky je to nezvyčajný výsledok. Najjednoduchšie by sme si totiž celý proces predstavovali takto: Žiarenie, dopadajúce na parafín, má istú frekvenciu ν . V parafíne sú elektróny, ktoré sa pod vplyvom dopadajúceho žiarenia rozkmitajú. Frekvencia ich kmitov bude zas rovná ν . Kmitajúce elektróny vysielajú do všetkých smerov žiarenie (tak ako malé antény). Žiarenie má už iný smer ako dopadajúce, a preto ho chápeme ako žiarenie rozptýlené na materiáli. Podstatné ale je, že rozptýlené žiarenie bude mať zas frekvenciu ν , lebo ju majú malé antény, ktoré ho vysielajú.

Comptonove pokusy ale ukázali, že vlnová dĺžka rozptýleného svetla je väčšia o $\Delta\lambda$, pričom

$$\Delta\lambda = 2A \sin^2 \frac{\varphi}{2}$$

kde A je konštanta rovná 0,002 4 nm a φ je uhol medzi dopadajúcim a rozptýleným žiarením.

Veľmi prirodzené vysvetlenie výsledku podali Compton a Debye. Jeho jednoduchosť je až prekvapujúca. Predstavme si, podobne ako pri Einsteinovej analýze fotoelektrického javu, že za proces zodpovedá interakcia jediného kvanta žiarenia s jediným elektrónom materiálu. Energia dopadajúceho kvanta nech je $\hbar\omega$. Podrobnejšia analýza problému ukazuje, že je rozumným priblížením považovať elektrón, na ktorý žiarenie dopadá, za voľný, to znamená, že nemusíme uvažovať výstupnú prácu, keď mu udelíme nejaký impulz. Energiu tohto elektrónu označíme E_1 . Kvantum žiarenia (po Comptonových experimentoch bolo nazvané fotónom, tak ho budeme v ďalšom nazývať aj my) sa zrazí s voľným elektrónom. Ich celková energia bude $\hbar\omega + E_1$. Uhlová frekvencia fotónu po zrážke nech je ω' a energiu elektrónu označíme E_2 . Zákon zachovania energie hovorí, že

$$\hbar\omega + E_1 = \hbar\omega' + E_2$$

Nárazom fotónu sa energia elektrónu zvýši – elektrón vyletí z atómu – a preto $E_2 - E_1 > 0$. Odtiaľ vidno, že $\omega' < \omega$. Pretože platí $\omega = 2\pi c/\lambda$, menšiemu ω bude odpovedať väčšie λ , a máme

$$\lambda' > \lambda$$

Takto prichádzame prirodzene k tomu, že rozptýlené žiarenie musí mať väčšiu vlnovú dĺžku. Podrobnejšia analýza zrážky vedie k presnému súhlasu s Comptonovými výsledkami.

Táto analýza je trochu náročnejšia na výpočet a pre pochopenie ďalšieho nie je nevyhnutná. Pre úplnosť ju tu však urobíme; čitateľ, ktorému by sledovanie jednotlivých argumentov robilo ťažkosť môže preskočiť zvyšok tohto článku. Pri odvodení Comptonovho vzťahu je potrebný zákon zachovania hybnosti, a na to musíme poznať hybnosť fotónu pred zrážkou aj po nej. Ak má fotón energiu E , jeho hybnosť p sa bude rovnať E/c (c je rýchlosť svetla vo vákuu) a smer hybnosti bude rovnaký ako smer, v ktorom sa fotón pohybuje. Vo formálnom zápise

$$p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}$$

Tento vzťah možno získať niekoľkými spôsobmi. Po prvé z Maxwellovej teórie elektromagnetického poľa. Pre záblesk svetla s určitou energiou teória predpovedá jednoznačne aj hybnosť záblesku a energia a hybnosť sú viazané práve vzťahom

$$p = \frac{E}{c}$$

Druhý spôsob je založený na argumentoch zo špeciálnej teórie relativity. Pre energiu E a hybnosť p častice s pokojovou hmotnosťou m_0 platí

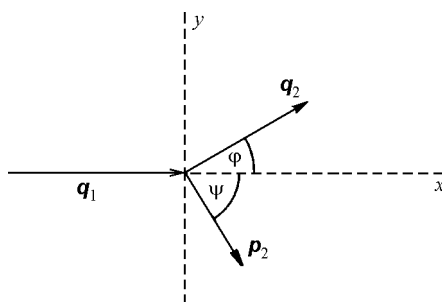
$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$$

Častica s nenulovou pokojovou hmotnosťou však nemôže nikdy dosiahnuť rýchlosť svetla. Preto fotónu musíme prisúdiť nulovú pokojovú hmotnosť a potom z predchádzajúceho vzťahu máme $p = E/c$. Napokon sa možno odvolať na experiment. V roku 1899 uskutočnil Lebedev pokusy, pri ktorých meral tlak vyvolaný žiarením dopadajúcim na tenký platinový lístoček zavesený na tenkom vlákne. Tlak je ale daný hybnosťou, ktorú žiarenie odovzdáva lístočku, a preto v Lebedevových pokusoch sa vlastne merala hybnosť žiarenia. Ukázalo sa, že výsledky plne súhlasili s predpoveďou Maxwellovej teórie a teda aj so vzťahom $p = E/c$.

Rozptyl fotónu na elektróne je znázornený na obr. 2.10. Zákon zachovania energie hovorí (m označuje pokojovú hmotnosť elektrónu),

$$\hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + E_2 \quad (1)$$

kde E_2 je daná relativistickým výrazom $E_2 = (m^2c^4 + p^2c^2)^{1/2}$



Obr. 2.10 Schéma rozptylu fotónu na elektróne: \mathbf{q}_1 – hybnosť fotónu pred zrážkou, \mathbf{q}_2 – hybnosť fotónu po zrážke, \mathbf{p}_2 – hybnosť elektrónu po zrážke

Hybnosť fotónu pred zrážkou má smer osi x a je rovná $\hbar\omega/c$. Táto hybnosť sa musí vzhľadom na zákon zachovania hybnosti rovnať súčtu priemetov hybnosti elektrónu a fotónu po zrážke do osi x . Z obr. 2.10 tak dostaneme

$$\frac{\hbar\omega}{c} = \frac{\hbar\omega'}{c} \cos\varphi + p_2 \cos\psi \quad (2)$$

Pred zrážkou bol priemet hybnosti fotónu do smeru osi y nulový. Preto musí byť nulový aj súčet priemetov hybností do osi y pre elektrón a fotón po zrážke. Odtiaľ máme

$$0 = \frac{\hbar\omega'}{c} \sin\varphi - p_2 \sin\psi \quad (3)$$

Ak z rovníc (1), (2), (3) po troche námahy vylúčime parametre p_2 , E_2 , ψ dostaneme

$$\omega - \omega' = \frac{2\hbar}{mc^2} \omega\omega' \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)$$

Využijeme teraz rovnicu

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$$

a dostaneme

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2 \frac{2\pi\hbar}{mc} \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)$$

a to je Comptonov vzťah, ktorý sme zapísali už predtým.

O správnosti analýzy hovorí to, že výraz $2\pi\hbar/mc$ je presne rovný konštante λ v Comptonovom vzorci. Comptonove výsledky takto definitívne potvrdili existenciu kvanta energie – fotónu.

Treba ale upozorniť na jedno nebezpečenstvo pochádzajúce z toho, že náš jazyk bol vytvorený na základe skúseností s makroskopickými telesami obsahujúcimi obrovské množstvá atómov, povedzme okolo 10^{23} atómov. Tento jazyk preto nemusí byť – a ani nie je – prispôbený pomerom vnútri atómov a kvantám žiarenia.

Ak povieme, že elektromagnetická vlna je roj fotónov, už podvedome si predstavujeme roj bodových častíc klasickej fyziky. Ale takáto analógia je chybná, slovo „fotón“ vôbec neoznačuje časticu klasickej fyziky. Hovorí len to, že energia a hybnosť elektromagnetickej vlny majú isté kvantové vlastnosti. Pojem fotónu musí v sebe obsahovať aj vlnové aj kvantové vlastnosti, lebo experimenty z 19. storočia, v ktorých bola dokázaná interferencia svetla, boli urobené korektne. Ak sa vám zdá, že si nemožno „predstaviť“ niečo, čo je zároveň vlnou aj časticou, tak si pripomeňme, že pri slove „predstaviť si“ máme – či už chceme, alebo nie – na mysli porovnanie s niečím známym z každodennej skúsenosti, a teda z klasickej fyziky. Niet však hlbších dôvodov očakávať platnosť klasickej fyziky pre deje na atomárnej úrovni.

Kvantovanie energie elektromagnetickej vlny je z hľadiska klasickej fyziky skutočne záhadou. Vyžarovanie energie pohybujúcimi sa nábojmi je z hľadiska klasickej fyziky spojitý proces a nie je jasné, kde sa tu môže objaviť dajaký kvantový prvok.

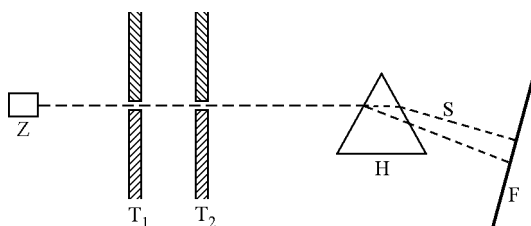
Klasickej fyziky bola dobre ba geniálne vymyslená stavba a keď sa ukázalo, že ju treba opraviť v jednom mieste, viaceri fyzikovia si uvedomili, že opravy budú potrebné aj inde. Napríklad kvantové vlastnosti žiarenia musia tesne súvisieť s mechanizmom emisie (vysielanie) a absorpcie (pohlcovanie) žiarenia, a preto tam skutočne aj došlo k zásadnej revízii klasickej predstavy.

2.5 ČIAROVÝ CHARAKTER ATÓMOVÝCH SPEKTIER BOHROVO VYSVETLENIE

Nová hlbšia teória zväčša zjednocuje viaceré zdanlivo nesúvisiace oblasti. Tak to bolo s Newtonovou mechanikou, ktorá zjednotila „pozemskú mechaniku“ a zákonitosti pohybu nebeských telies, tak to bolo s Maxwellovou teóriou elektromagnetickeho poľa, ktorá spojila elektrické a magnetické javy aj zákony šírenia svetla, a tak to bolo aj s kvantovou mechanikou.

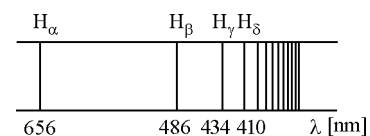
Doteraz sme sledovali dva „potôčiky“ poznatkov, ktoré „vtiekli“ napokon do kvantovej mechaniky. Prvým boli poznatky o veľkosti atómov a o ich štruktúre – tak sme sa dostali k obrazu atómu skladajúceho sa z maličkého jadra obsahujúceho takmer celú hmotnosť atómu a z ľahkých elektrónov vyplňajúcich celý objem atómu.

Druhý potôčik mal svoje začiatky v termodynamike a štatistickej fyzike a pri štúdiu vlastností žiarenia v dutinách zahriatych telies viedol k objavu Planckovho kvanta energie žiarenia.



Obr. 2.11a

Schéma experimentu na štúdium žiarenia vysielaného zahriatymi plynmi: Z – zdroj žiarenia, T_1 , T_2 – tienidlá s otvormi vymedzujúcimi úzky zväzok, H – hranol, F – fotografická platňa, S – svetelný zväzok rozštiepený hranolom podľa jednotlivých vlnových dĺžok



Obr. 2.11b

Čiarové spektrum atómu vodíka vo viditeľnej oblasti. Pod niektorými čiarami je naznačená ich vlnová dĺžka v nm

Ďalší potôčik – a o ňom budeme teraz stručne hovoriť – viedol z optiky a obsahoval informácie o vlastnostiach žiarenia vysielaného atómami. Už v 19. storočí bolo dobre známe, že zahriate pary rôznych látok vyžarujú čiarové spektrum – inak povedané, že intenzita žiarenia je veľká len pre niektoré vlnové dĺžky, všade inde je veľmi malá. Usporiadanie experimentov, v ktorých sa tieto otázky študovali, bolo v princípe nasledujúce (obr.2.11a): svetlo, ktoré vyžaruje plyn (zdroj Z), prechádzalo otvormi v tienidlách T_1 , T_2 , čím vznikol úzky svetelný zväzok dopadajúci na hranol H. V hranole sa svetlo

s rôznymi vlnovými dĺžkami láme rôznym spôsobom a takto rozložené svetlo dopadá na fotografickú platňu. Výsledky ukazujú, že na fotografiách sa objavuje len sčernenie²⁵ odpovedajúce niekoľkým, pomerne veľmi dobre definovaným vlnovým dĺžkam, čo ukazuje, že atómy vyžarujú len svetlo s určitými vlnovými dĺžkami. Rozloženie intenzity vysielaného žiarenia podľa vlnových dĺžok (alebo frekvencií) nazývame spektrom. Na obr. 2.11 b je spektrum atómu vodíka, ktoré je typickou ukážkou čiarového spektra. Podobný čiarový charakter majú aj spektrá iných atómov.

Pre klasickú fyziku bol čiarový charakter spektier záhadou, ktorú sa nepodarilo uspokojivo vyriešiť. Keby sme si totiž predstavili napríklad atóm vodíka ako malú planetárnu sústavu s elektrónom obiehajúcim okolo jadra, potom by elektrón musel vyžarovať, strácal by energiu a padal by na jadro. Obiehal by stále po menšej a menšej dráhe, frekvencia obehu by sa spojite menila a spektrum by nebolo čiarové. Výhodiskom by snáď mohol byť harmonický kmitavý pohyb elektrónu, pri ktorom frekvencia kmitov nezávisí od energie kmitajúcej častice a keby aj elektrón vyžaroval, frekvencia jeho kmitov by sa nemenila, a preto by sa nemenila ani frekvencia vysielaného žiarenia. Ale aj tu je háčik, skutočný harmonický pohyb nastáva vtedy, keď je sila úmerná výchylke a je opačne orientovaná. Ťažko ale prísť na to, ako môže takáto sila vzniknúť v atóme, kde je len elektrón a jadro, ktoré na seba pôsobia coulombovskou príťažlivou silou úmernou $1/r^2$, kde r je vzdialenosť medzi elektrónom a jadrom.

Na Rutherfordove výsledky nadviazal v r. 1912 Niels Bohr, vtedy mladý dánsky fyzik. Poznal aj Planckovu kvantovú hypotézu, aj Einsteinovu analýzu fotoelektrického javu, ktorá túto hypotézu potvrdila, a pozrel sa na problém z nového hľadiska – z hľadiska Planckovej teórie žiarenia. Ak totiž atóm vyžaruje len isté žiarenie s istými vlnovými dĺžkami, znamená to tiež, že vyžaruje svetlo len s určitými diskretnými hodnotami frekvencie. Určitým frekvenciám však odpovedajú určité energie svetelných kvánt (fotónov) a z tohto pohľadu vidno, že atóm vysiela len kvantá s určitými energiami typickými pre daný atóm. Na otázku, ako je to možné, odpovedal Niels Bohr, a rozriešil tým časť problému. Podľa Bohra:

- atóm sa môže nachádzať len v určitých kvantových stavoch s energiami $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$,
- pri prechode atómu zo stavu s energiou E_n do stavu s energiou E_m sa vyžiarí jediné svetelné kvantum. Jeho energia E a jeho uhlová frekvencia sú potom dané vzťahom

$$E = \hbar \omega = E_n - E_m$$

diktovaným zákonom zachovania energie. Tento vzťah sa nazýva Bohrova podmienka frekvencií.

Toto Bohrovo vysvetlenie charakteru čiarových spektier atómov odrazu vysvetľuje viacero vecí – čiarový charakter spektier sa stáva prirodzeným a ukazuje sa, že existencia fotónov, ako kvánt elektromagnetického vlnenia, tesne súvisí s tým, že atómy „produkovujú“ jednotlivé fotóny²⁶ pri prechodoch medzi jednotlivými kvantovými stavmi. Navyše tento pohľad na problém naznačuje aj východisko pri riešení problému stability atómov. Ak sa totiž atóm môže nachádzať len v určitých kvantových stavoch, bude medzi nimi existovať jeden, ktorý má najmenšiu energiu. Ak sa raz atóm nachádza v tomto základnom stave, tak už nemá stav s nižšou energiou, do ktorého by mohol samovoľne „preskočiť“, a je v tomto stave stabilný.

Ostáva ale ešte otázka: aký mechanizmus vedie k tomu, že atómy môžu byť iba v stavoch s určitými (diskretnými) hodnotami energie?

Vo svojich základných prácach Bohr navrhol aj model, ktorý umožňoval nájsť „povolené“ hodnoty energie jednotlivých kvantových stavov. V tomto modeli Bohr vychádzal z predstavy, že elektróny sa v atóme pohybujú po dráhach, na ktorých platia zákony klasickej fyziky s výnimkou zákona, podľa ktorého nabitá častica, pohybujúca sa so zrýchlením (hoci aj dostredivým), musí vyžarovať. Navyše, aby sa spomedzi klasickej dráh, pripúšťajúcich spojite sa meniacu energiu, vybrali len niektoré, t. j. tie, čo odpovedajú „kvantovým“ dráham doplnil Bohr schému predpisom, podľa ktorého sa vyberajú „úradne povolené“ dráhy.

Tento model priniesol viacero principiálnych ťažkostí: nedával všetky kvantové stavy atómu vodíka, nedával správny predpis pre možné priestorové orientácie „kvantových“ dráh, a hoci vysvetlil veľa

²⁵ Pri priamom pozorovaní v spektrografe vidno farebné čiary vo frekvenčnej oblasti viditeľného svetla, podstatné však je, že spektrum je čiarové.

²⁶ Bohr istý čas pochyboval o reálnej existencii fotónov, alebo, ako sa vtedy hovorilo, svetelných kvánt. To sú však historické „jemnôstky“, nepodstatné pre náš výklad.

vlastností spektra atómu vodíka, poskytoval viditeľné chybné výsledky pre spektrá zložitejších atómov – napr. hélia.

Povedzme to celé ešte raz: Bohrova interpretácia zákonitostí spektier pomocou kvantových stavov atómov, a teda aj Bohrova podmienka frekvencií, vošla nezmenená do základov kvantovej mechaniky. Bohrov model atómu vodíka – špeciálny predpis na výpočet kvantových stavov tohto atómu – bol iba prechodným štádiom, ale vari nepreháňame, ak povieme: bez tohto prechodného štádia by nebola vznikla kvantová mechanika ani v Heisenbergovej, ani v Schrödingerovej formulácii.

2.6 BOHROV MODEL ATÓMU VODÍKA

Pri práci s modelom atómu vodíka sa Bohr snažil nielen vysvetliť spektrá vodíka, ale chcel nájsť aj kľúč k hlbšiemu pochopeniu kvantových zákonitostí mikrosвета: V učebniciach sa Bohrov model spravidla uvádza štandardným spôsobom – uvedú sa tri Bohrove postuláty a z nich sa odvodí energetické hladiny atómu vodíka a frekvencie spektrálnych čiar. Tu sa budeme menej ponáhľať a ukážeme si tri rôzne pohľady na Bohrov model. Všetky tri pochádzajú od Bohra a ukazujú jeho cestu za poznaním zákonitostí mikrosвета. Najprv uvedieme štandardný učebnicový výklad Bohrovho modelu, potom sa vrátíme k tomu, čo tejto formulácii predchádzalo a napokon spomenieme aspoň stručne princíp korešpondencie, ktorý zohral závažnú úlohu vo vývoji kvantovej fyziky.

S dvoma postulátmi Bohrovho modelu sme sa stretli už v predchádzajúcom článku. Pripomeňme si ich:

1. Atóm sa môže nachádzať len v určitých kvantových stavoch s energiami $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$
2. Pri prechode atómu zo stavu s energiou E_n do stavu s energiou E_m sa vyžiarí jediné svetelné kvantum. Jeho energia E a jeho uhlová frekvencia sú potom dané vzťahom

$$E = \hbar \omega = E_n - E_m \quad (1)$$

Tieto dva postuláty boli geniálne „uhádnuté“ a ani neskorší vývoj kvantovej fyziky na nich nič nezmenil. Problémom bolo ale to, ako vypočítať hodnoty energií E_1, E_2, \dots . Pri riešení tohto problému Bohr najprv predpokladal, že v „kvantových“ stavoch platia zákony klasickej fyziky²⁷, ale pri prechode medzi týmito stavmi už zákony klasickej fyziky neplatia a namiesto nich sa uplatní Planckov-Einsteinov vzťah (1), ktorý dáva do súvisu energiu uvoľnenú pri danom prechode a frekvenciu vysielaného žiarenia.

Podľa klasickej fyziky je atóm vodíka jednoduchou „planetárnou“ sústavou, v ktorej elektrón obieha okolo protónu. Ak predpokladáme, že trajektória elektrónu je kruhová, bude elektrostatická príťažlivá sila medzi protónom a elektrónom práve udeľovať elektrónu potrebné dostredivé zrýchlenie. Takto máme

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m \frac{v^2}{r} \quad (2)$$

Po vynásobení oboch strán rovnice $r/2$ dostaneme

$$\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{1}{2} m v^2 \quad (3)$$

Na pravej strane máme kinetickú energiu elektrónu, na ľavej strane je $(-1/2) E_{\text{pot}}$, pričom pre elektrón pohybujúci sa po kruhovej dráhe je potenciálna energia E_{pot} , daná výrazom

$$E_{\text{pot}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (4)$$

P o z n á m k a. Výraz pre potenciálnu energiu je vybraný tak, aby bol splnený zákon zachovania energie. Ak elektrón premiestnime zo vzdialenosti $r + \Delta r$ od protónu do vzdialenosti r , tak úbytok potenciálnej energie sa rovná práci Coulombovej príťažlivej sily. Prítom predpokladáme, že veľkosť posunutia Δr je veľmi malá v porovnaní s r , teda $\Delta r \ll r$. Úbytok potenciálnej energie pri uvažovanom posunutí je

$$-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r + \Delta r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r(r + \Delta r)} \Delta r$$

²⁷ Aj tento predpoklad sa neskôr ukázal nesprávnym. S tým, že Bohrov model napriek tomu „pracoval“, sa budeme zaoberať neskôr.

Pre $\Delta r \ll r$ sa výraz $r(r + \Delta r)$ zanedbateľne málo líši od r^2 a pravá strana predchádzajúceho vzťahu je

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \Delta r = F \Delta r$$

kde F je veľkosť príťažlivej Coulombovej sily. Korektnosť predchádzajúceho zanedbania ukazuje presvedčivo až diferenciálny počet. Čitateľ mu snáď však uverí, ak si uvedomí, že v menovateli sme mali výraz $(r + \Delta r)$, takže Δr sme zanedbali vzhľadom na r , zatiaľ čo v čitateli máme len Δr , ktoré niet k čomu zanedbať. Navyše pri veľmi malom posunutí je Coulombova príťažlivá sila v dobrom priblížení konštantná a úbytok potenciálnej energie potom musí byť úmerný veľkosti posunutia Δr .

Potenciálna energia je zavedená tak, aby platilo

$$E_{\text{pot}}(r + \Delta r) - E_{\text{pot}}(r) = F \Delta r = E_{\text{kin}}(r + \Delta r) - E_{\text{kin}}(r)$$

pričom sme využili to, že práca Coulombovej sily sa rovná prírastku kinetickej energie. Predchádzajúci vzťah je ale zákonom zachovania energie

$$E_{\text{pot}}(r + \Delta r) + E_{\text{kin}}(r + \Delta r) = E_{\text{pot}}(r) + E_{\text{kin}}(r)$$

Výraz (4) pre potenciálnu energiu je vybraný tak, že pre $r \rightarrow \infty$ bude E_{kin} nulová.

V ďalšej diskusii budeme potrebovať vzťah medzi uhlovou frekvenciou ω elektrónu, pohybujúceho sa po kruhovej trajektórii, a jeho celkovou energiou. Pri jeho odvodení najprv úpravou (3) dostaneme

$$r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m v^2} \quad (5)$$

a po dosadení do vzťahu

$$\omega = \frac{v}{r}$$

dostaneme

$$\omega = \frac{4\pi\epsilon_0 m v^3}{e^2}$$

Jednoduchou úpravou máme

$$\omega = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 \sqrt{m}} (m v^2)^{3/2} = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 \sqrt{m}} (2E_{\text{kin}})^{3/2} \quad (6)$$

Teraz nájdeme vzťah medzi kinetickou a celkovou energiou. Vzťah (3) prepíšeme ako

$$-\frac{1}{2} E_{\text{pot}} = E_{\text{kin}}$$

Pre celkovú energiu potom máme

$$E = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = -2E_{\text{kin}} + E_{\text{kin}} = -E_{\text{kin}}$$

Celková energia je pri pohybe elektrónu po kruhovej dráhe záporná. Je to spôsobené tým, že záporná je potenciálna energia, ktorá je v absolútnej hodnote väčšia ako kinetická energia.

Po dosadení do (6) nájdeme

$$\omega_{\text{klas}} = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 \sqrt{m}} (-2E)^{3/2} \quad (7)$$

kde sme k uhlovej frekvencii ω pripísali index „klas“, aby sme zdôraznili, že je to uhlová frekvencia pohybu elektrónu po kruhovej trajektórii s energiou E . Teraz už môžeme uviesť sľúbené tri pohľady na Bohrov model.

Štandardný postup

V tomto prípade k dvom postulátom Bohrovho modelu pripájame tretí:

V n -tom kvantovom stave elektrónu pri pohybe po kruhovej dráhe platí

$$mvr = n\hbar \quad (8)$$

Ďalší postup je jednoduchý. Rovnicu (2) vynásobíme faktorom mr^3 a dostaneme

$$\frac{me^2 r}{4\pi\epsilon_0} = (mvr)^2$$

Do pravej strany dosadíme z (8) a jednoduchou úpravou nájdeme

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} n^2 = a_1 n^2 \quad (9)$$

kde index n naznačuje, že veličina sa vzťahuje na n -tý kvantový stav. Symbol a_1 označuje polomer prvej dráhy v Bohrovom modeli. Jeho číselná hodnota je

$$a_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (10)$$

Rýchlosť pohybu elektrónu na n -tej kvantovej dráhe určíme zo vzťahu (2):

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \frac{1}{n} = v_1 \frac{1}{n}$$

pričom hodnota v_1 je

$$v_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} c = \frac{1}{137} c \quad (11)$$

kde c je rýchlosť svetla vo vákuu. Pretože v_1 je značne menšie ako c , vidíme, že pohyb elektrónu v atóme je nerelativistický a že použitie nerelativistickej fyziky bolo oprávnené.

Energiu elektrónu na n -tej dráhe už spočítame ľahko. Stačí výrazy pre r_n , v_n dosadiť do vzťahu

$$E = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{1}{2} m v^2$$

Dostaneme tak

$$E_n = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = E_1 \frac{1}{n^2} \quad (12)$$

kde

$$E_1 = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} = -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

V atómovej fyzike udávame energiu zväčša v eV. V týchto jednotkách

$$E_1 = -13,6 \text{ eV}$$

Pri prechode z m -tého do n -tého stavu pre kruhovú frekvenciu vysielaného žiarenia platí podľa (1)

$$\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n = E_1 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = |E_1| \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Vlnová dĺžka vysielaného žiarenia λ_{mn} je s uhlovou frekvenciou ω_{mn} viazaná vzťahom

$$\lambda_{mn} = \frac{c}{\nu} = \frac{2\pi c}{2\pi\nu} = \frac{2\pi c}{\omega_{mn}}$$

kde ν je frekvencia žiarenia.

Vlnové dĺžky pre prechody z hladiny m na hladinu s $n = 2$ odpovedajú práve čiaram známej Balmerovej série. Čiary v infračervenej oblasti prislúchajú prechodom na hladinu $s = 3$ (Paschenova séria). Neskôr sa ukázalo, že v spektre atómu vodíka boli v ultrafialovej oblasti pozorované aj čiary odpovedajúce prechodom na hladinu $s = 1$ (Lymanova séria).

Ďalším úspechom Bohrovho modelu bolo potvrdenie predpovede pre spektrum ionizovaného atómu hélia – He^+ . V tomto atóme sa pohybuje jediný elektrón v Coulombovom poli v jadre hélia. Toto jadro je vlastne časticou α , jeho náboj je $+2e$. Energetické hladiny iónu He^+ dostaneme jednoducho z predchádzajúcich výsledkov, ak všade zameníme súčin ee na $e(2e)$.

Pôvodné odvodenie

V učebniciach sa vzťah (8) nazýva zväčša tretím Bohrovým postulátom a žiak už vie, že ak je niečo postulátom, má to chápať ako pravdu, na pôvod ktorej sa nemá spytovať. V skutočnosti Bohr vzťah, z ktorého vyplýva tento postulát, „uhádol“, lebo odvodiť ho nebolo odkiaľ, kvantová mechanika tak, ako ju poznáme dnes, ešte neexistovala. Cesta, ktorá ho priviedla k tretiemu postulátu, však nebola priama a tu si ju aspoň stručne naznačme. Bohr vychádzal z myšlienky o tom, že energie jednotlivých kvantových stavov by mali dajako súvisieť s uhlovými frekvenciami pohybu elektrónu po príslušných klasických trajektóriách. Takýto súvis medzi energiou a uhlovou frekvenciou totiž existoval v Planckovom a Einsteinovom vzťahu $E = \hbar\omega$, ktorý viazal energiu fotónu s uhlovou frekvenciou príslušnej elektromagnetickej vlny. Bohr sa preto pokúšal nájsť vzťah medzi energiou E_n a klasickou uhlovou frekvenciou $\omega_{\text{klas}}(E_n)$ určenou tak, že do vzťahu (7) dosadíme za E energiu E_n

$$\omega_{\text{klas}}(E_n) = \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2\sqrt{m}}(-2E_n)^{3/2} \quad (13)$$

Pritom skúšal možnosti vzťahov typu

$$E_n = f(n)\hbar\omega_{\text{klas}}(E_n)$$

kde funkcia $f(n)$ závisela od čísla n , priradeného k danému kvantovému stavu. K správne výsledku viedol predpoklad $f(n) = n/2$. Podmienka kvantovania mala potom tvar

$$E_n = \frac{n}{2}\hbar\omega_{\text{klas}}(E_n) \quad (14)$$

Teraz sa priamo presvedčíme o tom, že vedie k správne výsledku. Výraz pre $\omega_{\text{klas}}(E_n)$ dosadíme z (13) do (14) a máme

$$E_n = \frac{n}{2}\hbar\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2\sqrt{m}}(-2E_n)^{3/2}$$

Obe strany rovnice umocníme na druhú a po jednoduchej úprave prideme ku kvantovaniu energie podľa vzťahu (12).

Pri pohybe po kruhovej trajektórii v Coulombovom poli platí vzťah, ktorý sme si už odvodili, $E_{\text{kin}} = -\frac{1}{2}E_{\text{pot}}$, a pre celkovú energiu máme

$$E = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}E_{\text{pot}}$$

Potenciálna energia v n -tom stave je daná vzťahom (4) a v n -tom stave preto máme

$$\frac{1}{2}E_{\text{pot}} = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n} = -\frac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} = E_n$$

Odtiaľ ľahko určíme r_n a presvedčíme sa, že prideme zas ku vzťahu (9). Ak poznáme r_n , tak nájdeme aj v_n (pozri vzťah (11)).

Pozrime sa teraz na hodnotu, ktorú nadobúda v n -tom stave súčin mvr . Podľa (9) a (11) máme

$$mv_n r_n = m \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar n} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} n^2 = \hbar n$$

Takto Bohr prišiel k výsledku, ktorý sa v neskoršej formulácii Bohrovho modelu objavil ako tretí postulát (8). Jeho význam bol aj v tom, že veličina mvr , vystupujúca v (8), má jednoduchý fyzikálny význam – je to moment hybnosti častice pohybujúcej sa po kruhovej trajektórii.

Princíp korešpondencie

Asi najhlbšie „odvodenie“ kvantovania energie v atóme vodíka vychádza z princípu korešpondencie sformulovaného Nielsom Bohrom. Uvedieme tu základnú myšlienku tohto postupu, napriek tomu, že na jednom mieste budeme musieť použiť jednoduché derivovanie a integrovanie.

Podľa princípu korešpondencie musí kvantová a klasická fyzika viesť k rovnakým výsledkom v situáciách, kde je Planckova konštanta malá v porovnaní s veličinami toho istého rozmeru. Rovnaký rozmer ako \hbar má veličina $L = mvr$ (moment hybnosti). V n -tom kvantovom stave platí $L = n\hbar$. Pre veľké n , $n \gg 1$, bude tiež $L \gg \hbar$, a práve vtedy by mala klasická i kvantová fyzika viesť k rovnakej frekvencii žiarenia vysielaného elektrónom.

Podľa klasickej fyziky je predpoveď jasná. Ak má elektrón energiu E_n a pohybuje sa po kruhovej dráhe, tak uhlová frekvencia jeho pohybu je daná vzťahom (7). Žiarenie, ktoré bude elektrón v tejto situácii vysielat', musí mať tú istú uhlovú frekvenciu

$$\omega = \omega_{\text{klas}}(E_n) = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 \sqrt{m}} (-2E_n)^{3/2} \quad (15)$$

Predpoveď kvantovej fyziky vychádza z prvých dvoch Bohrových postulátov. Elektrón nachádzajúci sa na hladine s určitým n môže preskočiť do stavu s ľubovoľným $m < n$. Vzhľadom na to, že v klasickej fyzike sa mení energia elektrónu spojito, princíp korešpondencie naznačuje, že treba uvažovať len prechody zo stavu s daným n do stavu s $(n - 1)$. Pri takomto prechode bude mať žiarenie podľa druhého postulátu uhlovú frekvenciu

$$\omega_{\text{kvant}} = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_{n-1}) \quad (16)$$

Princíp korešpondencie žiada, aby pri veľkom n boli pravé strany v rovniciach (15) a (16) rovnaké. Závislosť E_n od n musí byť taká, aby táto podmienka platila. Pokúsime sa nájsť, či „uhádnut“, takúto závislosť E od n . Pravú stranu v (16) zapíšeme najprv ako

$$\frac{1}{\hbar} \frac{(E_n - E_{n-1})}{n - (n-1)} = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E_n}{\Delta n} \quad (17)$$

Výraz E_n má zmysel len pre celočíselné n , ale môžeme si predstaviť, že ho „dodefinujeme“ aj pre také n , ktoré nie sú celočíselné. Potom bude E funkciou n a na pravej strane v (17) môžeme podiel $\Delta E_n / \Delta n$ nahradit' približne deriváciou dE/dn . Pravá strana v (17) sa musí podľa princípu korešpondencie rovnat' pravej strane v (15), a to nás vedie k rovnici

$$2\hbar \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 \sqrt{m}} (-2E)^{3/2} = \frac{dE}{dn} \quad (18)$$

Priamo sa môžeme presvedčiť o tom, že riešením tejto rovnice je

$$E(n) = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{(n+b)^2} \quad (19)$$

Hodnota konštanty b nie je rovnicou určená. Ak však porovnáme predpovedané hodnoty $E(n)$ s energetickými hladinami atómu vodíka, prideme k tomu, že súhlas dostaneme pre $b = 0$ a prichádzame zas k výrazu (12), ktorý sme získali už skôr dvoma odlišnými prístupmi.

V skutočnosti aj tu bola história zložitejšia, ako sme to naznačili. Bohr si totiž najprv všimol, že pre uhlové frekvencie prechodov platí nerovnosť

$$\omega_{n+1,n} < \omega_{\text{klas}}(E_n) < \omega_{n,n-1} \quad (20)$$

čo po dosadení z predchádzajúcich vzťahov ekvivalentné²⁸

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar} < \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2\sqrt{m}}(-2E)^{3/2} < \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} \quad (21)$$

S rastúcim n sa rozdiel medzi $\omega_{n+1,n}$ a $\omega_{n,n-1}$ postupne znižuje, hodnota $\omega_{\text{klas}}(E_n)$ je „zacviknutá“ v znižujúcom sa intervale a blíži sa postupne k hodnotám $\omega_{n+1,n} \approx \omega_{n,n-1}$. Ak túto skutočnosť odporozovanú zo spektra atómu vodíka a príslušných frekvencií klasického pohybu „povýšime“ na postulát (princíp korešpondencie), môžeme tak, ako sme už naznačili, vypočítať energetické hladiny atómu vodíka.

Poznamenajme ešte, že v histórii fyziky sa často stáva, že odporozovaná skutočnosť je neskôr povýšená na postulát – tento obrat použil napr. A. Einstein pri budovaní špeciálnej i všeobecnej teórie relativity.

* * *

Bohrov model vysvetlil spektrum atómu vodíka, čo presvedčivo naznačovalo, že Bohr bol aspoň v niečom na správnej ceste. Model mal ale aj svoje problémy. Uvedme aspoň niektoré:

- model zlyhal pri pokusoch o vysvetlenie spektier atómov s viacerými elektrónmi,
- viedol k predstave atómu vodíka ako plošného útvaru (elektrón sa pohyboval v jednej rovine), ktorá bola v rozpore s kvalitatívnymi informáciami z fyziky i z chémie,
- „tretí postulát“ v takom, či onakom tvare nevyplýval zo samotnej teórie, ale bol do nej prinesený „zvonku“.

Tieto nedostatky boli prekonané až neskôr v kvantovej mechanike.

* * *

V škole sa fyzika niekedy vyučuje ako súbor pravd vyplývajúcich zo všeobecnejších „poznatkov“ či „zákonov“, alebo priamo z experimentu. Takýto pohľad na fyziku poskytuje ale len časť pravdy. Keď sa nové teórie rodia, argumenty nevyplývajú zo žiadnych postulátov, mnohé treba uhádnuť a na každý výsledok je užitočné pozrieť sa z viacerých strán, aby ho bolo možné využiť na ďalšie predpovede fyzikálnych výsledkov, a tým ho znova overiť alebo zmeniť. Niekedy sa ukáže, že riešenie je v celkom novom pohľade na získaný výsledok. Tak to bolo napokon aj s Bohrovým modelom atómu vodíka. Nový pohľad bol umožnený až de Broglieho hypotézou o vlnových vlastnostiach elektrónu. Tento pohľad, do dôsledku rozpracovaný Schrödingerom, prirodzene, vysvetlil aj kvantovanie momentu hybnosti a priviedol až ku kvantovomechanickému modelu atómu. S týmito myšlienkami sa ale budeme podrobne zaoberať neskôr.

Hoci bol Bohrov model prekonaný, predsa vari bolo pre čitateľa užitočné, keď trochu nazrel do kuchyne veľkého fyzika. Nie je to kuchyňa čarodějníka, ale ani kuchyňa absolútneho pedanta, v ktorej je všetko vypočítané na miligramy a nijaké jedlo sa nepriškvárí. Bohrovi slúži ku cti, že sám vystihol kde boli slabé miesta v jeho modeli a spolu s inými sa usiloval o hlbšie vysvetlenie štruktúry atómu. Táto snaha bola napokon korunovaná úspechom v práci Bohrovho mladšieho spolupracovníka Wernera Heisenberga, ktorý vychádzajúc z Bohrovho princípu korešpondencie objavil základné zákony kvantovej fyziky v maticovej mechanike.

„Stará“ kvantová teória

V jednej z formulácií Bohrovho modelu atómu vodíka sme sa stretli s podmienkou

$$mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots \quad (B)$$

kde m je hmotnosť elektrónu, v je jeho rýchlosť pri pohybe po kvantovej dráhe s polomerom r . Táto podmienka vyberala spomedzi všetkých možných klasických (nekvantových) kruhových dráh elektrónu len niektoré „povolené“, odpovedajúce kvantovým stavom. Sommerfeld a Wilson si r. 1915 všimli, že

²⁸ Odporúčame čitateľovi, aby sa presvedčil o splnení tejto nerovnosti pre E_n dané vzťahom (12).

Bohrovu podmienku možno zovšeobecniť. Ak ju násobíme 2π a využijeme to, že mvr je moment hybnosti, ktorý označíme písmenom L , máme

$$L2\pi = 2\pi n\hbar$$

Ľavú stranu môžeme prepísať ešte ako

$$\int_0^{2\pi} L d\varphi = 2\pi n\hbar$$

kde φ je uhol, ktorý zvierá sprievodič elektrónu s určitou osou ležiacou v rovine jeho pohybu. Uhol φ sa zmení o 2π práve pri jednom obehu elektrónu. Poslednú rovnicu preto píšeme v tvare

$$\oint L d\varphi = 2\pi n\hbar$$

kde koliesko v symbole integrálu označuje integrovanie za jeden obch elektrónu.

V klasickej fyzike sa často stretávame s dvojicami (kónonicky) združených premenných. Typickou dvojicou združených premenných je napr. (p_x, x) alebo (p_y, y) , alebo (L, φ) . Pritom p_x je x -ová zložka hybnosti atď. Pretože Bohrova podmienka v práve predchádzajúcom tvare zahrnuje dvojicu združených premenných, možno očakávať, že jej zovšeobecnená formulácia bude platiť pre hocikáku dvojicu združených premenných za predpokladu, že častica koná periodický pohyb. Pri jednorozmernom pohybe častice takto dostávame Bohrovu-Sommerfeldovu podmienku

$$\oint p dx = 2\pi n\hbar \quad (\text{BS})$$

„Stará kvantová teória“ vychádzala pri ľubovoľných periodických pohyboch z podmienok typu (BS) pre všetky dvojice združených premenných. Pozrime sa teraz na jednoduchom príklade lineárneho harmonického oscilátora, ako táto podmienka „pracuje“. Ako vieme z klasickej fyziky, pri lineárnom harmonickom oscilátore je sila F pôsobiaca na kmitajúcu časticu priamo úmerná výchylke x častice z rovnovážnej polohy

$$F = -kx$$

Potenciálna energia častice vychýlenej o x z rovnovážnej polohy je

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

Celková energia častice je

$$E = \frac{1}{2} mv^2 + \frac{1}{2} kx^2$$

Konštantu k spravidla zapisujeme ako $k = m\omega^2$ a kinetickú energiu vyjadrujeme pomocou hybnosti $p = mv$. Takto máme

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (\text{E})$$

Výraz na ľavej strane podmienky (BS) má jednoduchý geometrický význam. Ak trajektóriu častice znázorníme v rovine tak, že na os x nanášame súradnicu x a na os y nanášame hybnosť p , tak $\oint p dx$ sa rovná obsahu plochy vnútri trajektórie v rovine x, p .

Pre lineárny harmonický oscilátor túto plochu nájdeme jednoducho. Vzťah (E) prepíšeme na tvar

$$1 = \frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

Toto je rovnica elipsy s polosami

$$a = \sqrt{2mE}, \quad b = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

Obsah tejto elipsy sa rovná πab , a to je práve výraz na ľavej strane (BS). Podmienka (BS) nám preto hovorí

$$\pi ab = 2\pi n\hbar$$

Ak za a , b dosadíme, po jednoduchej úprave dostaneme

$$E = n\hbar\omega$$

čo je v skutočnosti Planckov vzťah pre kvantovanie energie lineárneho harmonického oscilátora. Podmienka (BS) sa niekedy písala aj v tvare

$$\oint p dx = 2\pi n\hbar + J_0$$

kde J_0 bola konštanta nezávislá od n , určená porovnaním vypočítaných hodnôt energie s experimentom.

Bohrova-Sommerfeldova podmienka (BS) bola síce zovšeobecnením Bohrovej kvantovej podmienky (B), ale toto zovšeobecnenie nezmenilo fyzikálnu podstatu modelu. Predpokladalo sa zas, že častica sa pohybuje po klasickej trajektórii a že podmienka (BS) vyberá len niektoré spomedzi všetkých povolených klasických trajektórií. Podstata kvantovej podmienky (BS) ostávala rovnako neznáma a nejasná ako podstata pôvodnej Bohrovej podmienky (B).

Až neskôr sa ukázalo, že problém bol ešte hlbšie. Bolo potrebné vzdať sa celkom predstavy o tom, že mikročastice ako elektrón a pod. sa pohybujú po určitých trajektóriách. Ale o tom budeme hovoriť v ďalšom.

2.7 KVANTOVANIE ENERGIE ATÓMOV AKO EXPERIMENTÁLNY FAKT POKUSY FRANCKA A HERTZA

Základnou myšlienkou Bohrovho výkladu čiarového charakteru atómových spektier bolo to, že atómy sa môžu nachádzať iba v určitých „kvantových“ stavoch, v ktorých majú iba určité diskkrétne hodnoty energie. Myšlienka je taká revolučná a v takom protiklade s klasickou fyzikou, že sa treba pri nej na chvíľu zastaviť.

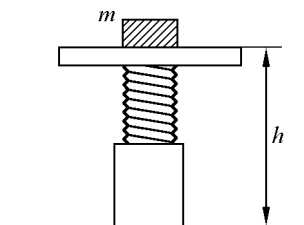
V klasickej fyzike sa totiž energia sústavy môže meniť spojite. Predstavme si napríklad teleso hmotnosti m v gravitačnom poli Zeme. Jeho potenciálna energia je mgh a ak je teleso v pokoji, je to jeho celková energia. Môžeme si ale tiež predstaviť, že teleso je na podložke upevnenej na skrutke a výšku h môžeme touto skrutkou spojite regulovať. Preto energia

$$E = mgh$$

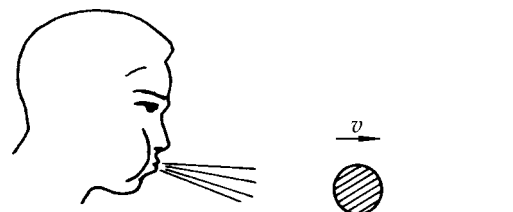
sa môže meniť spojite (obr. 2.12a). Podobne si môžeme predstaviť guľôčku s hmotnosťou m , ktorá sa kotúľa po vodorovnej rovine bez trenia rýchlosťou v . Jej celková energia, rovná kinetickej energii, je v tomto prípade

$$E = \frac{1}{2}mv^2$$

Môžeme si teraz predstaviť, že jemne – skutočne veľmi jemne – fúkneme do guľôčky a máličko zmeníme jej rýchlosť z v na $v' = v + \Delta v$. Keďže Δv môže byť ľubovoľne malé, môžeme takto zmeniť kinetickú energiu o ľubovoľne málo (obr. 2.12b).



Obr. 2.12a Znáznornenie spojitaj regulácie potenciálnej energie telesa spojitým zdvíhaním podložky. Výšku telesa regulujeme otáčaním skrutky, na ktorej je teleso



Obr. 2.12b Spojitá regulácia kinetickej energie častice $mv^2/2$. Jemným fúknutím meníme rýchlosť častice v ľubovoľne málo. (Pri technickej realizácii by bolo treba postupovať inteligentnejšie)

Už sme hovorili o tom, že fyzici majú zdravý konzervativizmus a snažia sa nové fakty vysvetliť podľa dobre známych a osvedčených princípov. Je to tak trochu ako v dobrej detektívke – všetko najprv vyzerá

úplne nepochopiteľne, ale napokon „Veľký Detektív“ nájde celkom prirodzené vysvetlenie. A keby vysvetlenie nebolo prirodzené, čitateľ by sa cítil oklamáný.

Vo fyzike je to v niečom podobné a v niečom podstatne odlišné. Skutočne, väčšinu nových experimentálnych údajov sa podarí vysvetliť „prirodzene“, t. j. pomocou už známych princípov. Ale občas sa stane, že sa objavia nové fakty, ktoré sa nijako nedajú uložiť do schémy známych princípov a treba nájsť nové princípy. Vo fyzike 20. storočia boli dve takéto skupiny faktov. V prvej skupine platilo, že rýchlosť svetla nezávisí od rýchlosti pozorovateľa voči zdroju svetla. Aby sa tento fakt vysvetlil, musela vzniknúť špeciálna teória relativity, ktorá zmenila naše predstavy o priestore a čase.

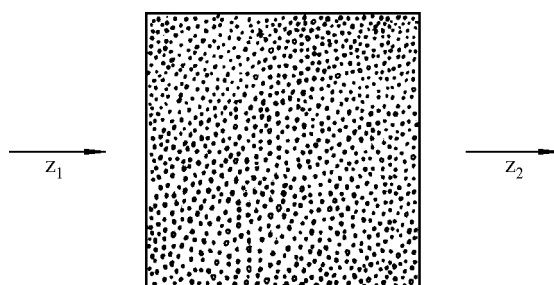
Druhú skupinu faktov, ktoré sa nedali vtesnať do rámca klasickej fyziky, tvorili výsledky o kvantovaní energie žiarenia a atomárnych sústav. Tieto fakty protirečili princípom klasickej fyziky natoľko, že musela vzniknúť nová teória, ktorá by ich prirodzene vysvetľovala. Na tom, že táto teória protirečí duchu klasickej fyziky, nie je nič nezvyčajné, nezvyčajné sú už samotné experimentálne fakty, ktoré teória musí vysvetliť. Tri možnosti toho, čo teória robí s experimentálnymi faktmi, by sme snáď mohli zhrnúť takto:

- obyčajné fakty vysvetľované obyčajným spôsobom, t. j. obyčajnou teóriou (analógie: každodenná skúsenosť, zápisnica zo schôdze, vyšetrovanie obyčajného priestupku či dopravnej nehody),
- neobyčajné fakty vysvetľované obyčajnými princípmi pomocou výnimočne rafinovaného a inteligentného usudzovania (analógie: riešenie komplikovaného technického problému, dobré detektívky,...),
- neobyčajné fakty, ktoré potrebujú vysvetlenie na základe nových a v rámci predchádzajúceho spôsobu uvažovania neobyčajných a zdanlivo nepochopiteľných princípov. Táto situácia je typická pre vznik nových fyzikálnych teórií. Analógie existujú napr. v matematike – vznik neeuklidovskej geometrie či integrálneho a diferenciálneho počtu, v ostatných vedách (objav dvojitej špirály v biológii,...) a v oblasti umenia im snáď odpovedajú diela obsahujúce nový pohľad na človeka a spoločnosť.

Analógie medzi vedou a inými oblasťami ľudskej činnosti prenecháme na ďalšie premýšľanie čitateľom a vrátime sa k jednej skupine experimentálnych faktov, ktoré si vynútil nový pohľad na zákonitosti vo svete atómov – ku kvantovaniu energetických hladín.

Predpoklad o existencii kvantových stavov, t. j. stavov s istými diskretnými hodnotami energie, bol plne potvrdený v experimentoch Francka a Hertza.

Princíp, ale skutočne iba princíp ich experimentu²⁹, ktorý bol publikovaný v roku 1914, je vidno na obr. 2.13a. Na obr. 2.13b je náčrt, ktorý priložili autori k svojmu článku uverejnenému v časopise Nemeckej fyzikálnej spoločnosti v Berlíne v r. 1914 na str. 512. V experimente zväzok elektrónov s určitou energiou E prechádzal parami ortuti a meraním energie elektrónov, ktoré prešli plynom, sa vlastne merala energia, ktorú elektróny stratili pri zrážkach s atómami. Ukázalo sa, že elektróny strácajú energiu 4,9 eV alebo jej celočíselný násobok³⁰.



Obr. 2. 13a Princíp pokusu Francka a Hertza. Na nádobu s plynom (napr. pary ortuti) dopadá zväzok elektrónov z_1 s danou energiou E . V experimente sa merajú energie elektrónov zväzku z_2 , t. j. po prechode plynom

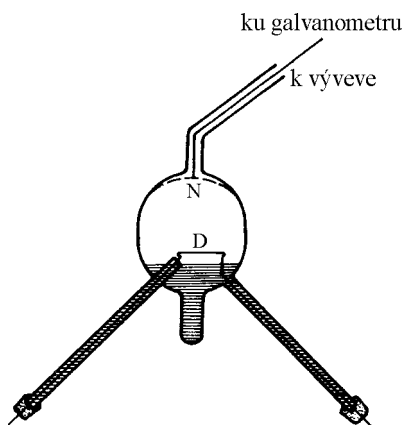
²⁹ Podrobnejší opis experimentu Francka a Hertza nájde čitateľ v už citovanej knihe G. Trigga, doslovné znenie ich článku v knihe Haar, D. ter: Quantentheorie (Einführung und Originaltexte). Berlin, Akademie Verlag 1970.

³⁰ 1 eV je jednotka energie často používaná v atómovej fyzike. Je to energia, ktorú získa častica s elementárnym nábojom $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C pri prechode potenciálovým rozdielom jedného voltu. Pretože $V \cdot C = J$ (joule) máme $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Jednotka je veľmi pohodlná, lebo na jednej strane viaže energiu častice priamo s potenciálom, ktorým sme ju urýchlili, a na druhej strane sú zvyčajné energie v oblasti atómovej fyziky v oblasti 10^{-2} až 10 eV, takže energia sa vyjadruje v týchto jednotkách bez komplikovaných exponentov.

Pritom si treba uvedomiť jednu veľmi dôležitú okolnosť: pri pružnej zrážke (t. j. vtedy, keď sa nemení vnútorná štruktúra atómu) ľahkého elektrónu s oveľa ťažším atómom, sa môže podstatne zmeniť smer pohybu elektrónu, ale jeho energia sa prakticky nemení. Je to niečo podobné, ako keď sa zrazí ľahká stolnotenisová loptička s ťažkou olovenou guľou. Poďme odhadnúť, ako sa pri takejto zrážke môže zmeniť energia ľahkej častice (či už elektrónu alebo loptičky). Hmotnosť ľahkej častice označíme m , hmotnosť ťažkej M . Hybnosť ľahkej častice pred zrážkou nech je p . Hybnosť ľahkej častice sa môže pri náraze zmeniť o $2p$ (odraz dozadu). Túto hybnosť získa ťažká častica a jej energia bude

$$\delta E = \frac{1}{2M} (2p)^2 = 4 \frac{p^2}{2M} = 4 \left(\frac{m}{M} \right) \frac{p^2}{2m}$$



Obr. 2.13b Franckov a Hertzov náčrt ich pokusu z roku 1914. Kremíková banka bola sčasti naplnená ortuťou. Rozžhavený platinový drôt D emitoval katódové lúče (t. j. elektróny), platinovú mriežku N spojili cez galvanometer so zemou. Pri tlaku 1 mm Hg (133,3 Pa) a teplote 150 °C zvyšovali napätie na katóde na 4,9 V. Pri tomto napätí sa popri čiarach od rozžhavenej platinovej katódy objavila v spektroskope čiara z ortuťového spektra, a to s vlnovou dĺžkou 253,6 nm. Pri teplote 150 °C ortuťové pary nijaké svetlo nevysielajú. Pri oveľa vyšších teplotách vyšle ortuť celú sériu spektrálnych čiar. Franck a Hertz registrovali jedinú čiaru zo spektra ortuti v závislosti od energie elektrónov vyletujúcich z katódy

To, čo na energii získala ťažká častica, musela ľahká častica stratiť, a preto δE je zhruba horný odhad energie stratenej ľahkou časticou. Pretože $p^2/2m = E$ je energia ľahkej častice pred nárazom, máme

$$\frac{\delta E}{E} = 4 \frac{m}{M} \approx 4 \frac{1}{2\,000 \cdot 200} = 10^{-5}$$

pričom sme v numerickom odhade využili už to, že elektrón je asi 2 000-krát ľahší ako atóm vodíka a atóm Hg je asi 200-krát ťažší ako atóm vodíka.

V experimente strácali elektróny celočíselný násobok veličiny $\Delta E = 4,9$ eV. Vysvetľujeme si to tak, že atóm má dva kvantové stavy odlišujúce sa energiou práve rovnou $\Delta E = 4,9$ eV, pri zrážke elektrónu s atómom preskočí do stavu s vyššou energiou a elektrón túto energiu stratí. Elektróny, ktoré stratili energiu $2\Delta E$, sa potom zúčastnili na dvoch takýchto zrážkach a tie čo stratili $n\Delta E$, sa zúčastnili na n zrážkach.

Experimenty Francka a Hertza takto plne potvrdili myšlienku o existencii kvantových stavov atómov. Pri týchto experimentoch bolo dôležité, že existencia kvantových stavov bola dokázaná v procesoch, kde nešlo o absorpciu žiarenia, a teda kvantovanie energetických stavov atómov sa ukázalo byť univerzálnou zákonitosťou.

Výsledky ich experimentov o zrážkach elektrónov s atómami ortuti z hľadiska Bohrovho modelu možno zhrnúť takto:

– Atómy ortuti odrážajú elektróny bez straty energie, pokiaľ je kinetická energia menšia ako $h\nu$, kde ν je frekvencia odpovedajúca rezonančnej čiare. Podľa Bohrovej teórie $h\nu$ sa rovná energii prechodu medzi dvoma hladinami atómu.

– Keď dosiahne kinetická energia elektrónu $h\nu$, preniesie sa toto kvantum energie na atóm a neskôr pri prechode atómu do nižšej hladiny na žiarenie s frekvenciou ν .

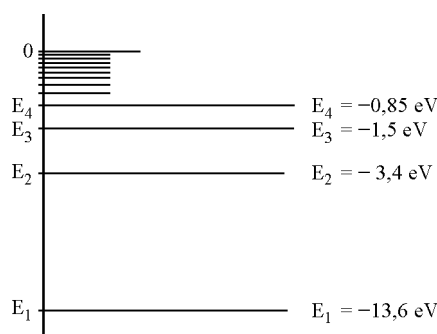
– Z uvedených experimentov dostali $h \equiv 2\pi\hbar = 6,59 \cdot 10^{-34}$ J s chybou menšou ako 2 %.

Bohrova myšlienka o pôvode atómových spektier a experimenty typu Francka a Hertza umožňujú „mapovať“ energetické rozdiely kvantových stavov v atóme. Ak napríklad vieme, že atóm vyžaruje spektrálnu čiaru s vlnovou dĺžkou λ , vieme, že tomu odpovedá emisia fotónov s uhlovou frekvenciou $\omega = 2\pi c/\lambda$, a energiou $\hbar\omega$. V atóme preto musia existovať dve energetické hladiny E_n, E_m s rozdielom energie

$$E_n - E_m = \hbar\omega$$

Podobne, ak pri prechode cez pary daných atómov elektróny strácajú energiu ΔE alebo jej celočíselný násobok, vieme, že atóm má dve energetické hladiny, ktorých rozdiel je práve rovný ΔE .

Každému atómu takto môžeme priradiť istú schému energetických hladín. Ako príklad je na obr. 2.14 schéma energetických hladín atómu vodíka. Podľa bežnej konvencie (dohody) je nula na tejto schéme zvolená tak, aby elektrón nachádzajúci sa veľmi ďaleko od jadra vodíka mal práve nulovú energiu. Záporné energie na obr. 2.14 odpovedajú potom elektrónu viazanému v atóme. Energia hladiny s najnižšou energiou má teda jednoduchý fyzikálny význam. Ak je atóm vodíka v najnižšom stave (základný stav), potom na to, aby sme elektrón „vyrazili“ z atómu vodíka, musíme mu dodať práve energiu 13,6 eV. Túto energiu nazývame ionizačnou energiou. Pretože 13,6 eV je práve súčinom elementárneho náboja e a potenciálového rozdielu 13,6 V vidíme, že potrebnú energiu by mal práve elektrón urýchlený potenciálovým rozdielom 13,6 V. Tento potenciál nazývame ionizačným potenciálom.



Obr. 2.14 Energetické hladiny atómu vodíka

2.8 ZHRNUTIE ZÁKLADNÝCH VELIČÍN

V tomto krátkom článku urobíme stručný prehľad základných veličín atómovej fyziky a hlbšie súvislosti medzi nimi si všimneme podrobnejšie až v nasledujúcej kapitole.

Avogadrova konštanta udáva počet atómov v jednom kilomóle, t. j. v toľkých kilogramoch látky, ako je hmotnosť daného atómu vyjadrená v atómových jednotkách (t. j. zhruba v hmotnostiach atómu vodíka)

$$N_A = 6,022 \cdot 10^{26} \text{ kmol}^{-1}$$

Elementárny náboj sa rovná absolútnej hodnote náboja elektrónu alebo náboju jadra atómu vodíka (protónu)

$$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Hmotnosť atómu vodíka

$$m_H = 1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Hmotnosť elektrónu

$$m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

Rozmery atómov sú rádovo 10^{-10} m. Z historických dôvodov sa najčastejšie používa Bohrov polomer atómu vodíka

$$a_1 = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m} \left(= \frac{\hbar^2}{m_e K e^2} \right)$$

pričom sme v zátvorke uviedli aj vyjadrenie Bohrovho polomeru spôsobom, s ktorým sa zoznámime neskôr.

Energie atómov najčastejšie vyjadrujeme v „elektrónvoltoch“, pričom

$$1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Pre opis vlastností žiarenia je dôležitou veličinou rýchlosť svetla vo vákuu

$$c = 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1} \quad c = 3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

Kvantové vlastnosti žiarenia aj kvantové vlastnosti atómov sú charakterizované Planckovou konštantou

$$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

Niekedy sa používa aj veličina

$$h = 2\pi\hbar = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

Coulombov zákon pre silu interakcie dvoch častíc s nábojmi e_1, e_2 má tvar

$$F = K \frac{e_1 e_2}{r^2}, \quad K = 9 \cdot 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{C}^{-2}$$

Postupné vlnenie (rovinná vlna) je charakterizované:

- frekvenciou ν
- uhlovou frekvenciou $\omega = 2\pi\nu$
- rýchlosťou c
- vlnovou dĺžkou $\lambda = c/\nu$
- periódou $T = 1/\nu$

Energia fotónu odpovedajúceho žiarenia s vlnovou dĺžkou λ a uhlovou frekvenciou ω je podľa Planckovho a Einsteinovho vzťahu

$$E = \hbar\omega = 2\pi\hbar\nu = 2\pi\hbar c/\lambda$$

Hybnosť takéhoto fotónu je

$$p = E/c = 2\pi\hbar/\lambda$$

Pre uhlovú frekvenciu fotónu vyžiareného pri prechode z m -tej na n -tú kvantovú hladinu atómu platí Bohrov vzťah

$$\hbar\omega = E_m - E_n$$

Energia základného stavu atómu vodíka

$$E_1 = -13,6 \text{ eV} \left(= -\frac{m_e K^2 e^4}{2\hbar^2} \right)$$

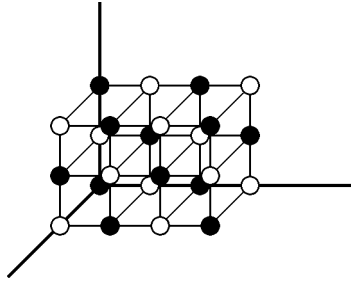
2.9 MÚDROŠŤ VCHÁDZA DO HLAVY RUKOU ALEBO NIEKOĽKO ÚLOH A PRÍKLADOV

Ludia si často myslia, že múdrosť vchádza do hlavy očami a ušami, ale nie je to celkom pravda. V skutočnosti múdrosť vchádza do hlavy rukou, a to práve vtedy, keď ruka drží ceruzku a rieši úlohy či problémy. Nie je to tak len vo fyzike, ale asi aj v iných oblastiach ľudskej činnosti – napríklad v umení, kde je jednou vecou čítať si niečo o maliarstve či sochárstve, a druhou vecou skúsiť držať štetec či dláto

v ruke. Na skutočnú znalosť predmetu treba asi vedieť niečo z oboch strán, teda aj z počutia a videnia (čítania), aj z vlastnej skúsenosti.

Význam riešenia úloh asi najkrajšie vystihuje Bohrov citát: „Odborníkom v danej oblasti je ten, kto už v nej urobil všetky chyby, čo sa dajú urobiť“. A riešenie úloh – to už je naša interpretácia Bohrovej myšlienky – je vynikajúcou príležitosťou na robenie všetkých možných chýb a omylov. Kto neverí, nech skúsi.

V ďalšom preto uvedieme niekoľko príkladov k otázkam, ktoré sme v tejto kapitole preberali. Začneme s Avogadrovou konštantou, ktorá je vlastne prekladovým slovníkom pre prechod od jazyka veľkých telies našej každodennej skúsenosti k jazyku sveta atómov a molekúl. Pri niektorých úlohách uvedieme aj riešenie, pri iných len stručný návod a pri ďalších celkom nič. Predpokladáme, (asi naivne), že na riešenia a návody sa čitateľ pozrie až potom, keď už úlohu skúsil sám vyriešiť.



Obr. 2.15 Schéma kryštálu kuchynskej soli. Plné guľôčky označujú atómy sodíka (Na), prázdne atómy chlóru (Cl)

Príklad 1. Kryštál NaCl má pravidelnú kubickú štruktúru. Predstavme si ju ako tesne pri sebe usporiadané kocky, pričom v ich vrchoch sú striedavo atómy Na a Cl (obr. 2.15). Odhadnite vzdialenosť medzi atómom Na a susedným atómom Cl, ak viete, že hustota kryštalického NaCl je $2,16 \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ a že molekulová hmotnosť NaCl je 58,5 (atóm Na je 23-krát a atóm Cl 35,5-krát ťažší ako atóm vodíka).

Riešenie. V 1 m^3 je

$$n = \frac{2,16 \cdot 10^3}{58,5} \cdot 6 \cdot 10^{26} = 2,2 \cdot 10^{28}$$

„molekúl“ NaCl a teda $4,4 \cdot 10^{28}$ atómov bez ohľadu na to, či je to atóm Na alebo Cl. Ak si predstavíme celý kryštál rozdelený na malé kocky, pričom v strede každej z nich sa nachádza nejaký z atómov, potom na jednu kocku pripadne objem

$$V = \frac{1 \text{ m}^3}{n} = \frac{1 \text{ m}^3}{4,4 \cdot 10^{28}} = 2,2 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

Dĺžka hrany kocky d je rovná vzdialenosti dvoch susedných atómov a platí pre ňu

$$d = \sqrt[3]{V} = \sqrt[3]{2,2 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3} = 2,8 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Príklad 2. Za normálnej teploty sa plynňý vodík skladá z molekúl H_2 , ktoré obsahujú dva spolu viazané atómy vodíka. Pri veľmi vysokých teplotách sa každá z molekúl štiepi na dva atómy. Na takéto rozštiepenie je potrebné dodať jednému kilomólu H_2 (t. j. 2 kilogramom) energiu 433 400 kJ. Aká energia je potrebná na roztrhnutie jednej molekuly H_2 (túto energiu nazývame väzbovou energiou molekuly)?

Riešenie je jednoduché

$$E = \frac{433\,400 \text{ kJ}}{6 \cdot 10^{26}} = 7,2 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Príklad 3. Odhadnite energiu potrebnú na vytrhnutie jednej molekuly vody, ak viete, že na vyparenie jedného kilomólu vody, t. j. 18 kg (už zohriatych na $100 \text{ }^\circ\text{C}$) potrebujeme dodať energiu zhruba 38 000 kJ.

Riešenie. Postupom podobným ako v predchádzajúcom príklade dostaneme

$$E = 0,36 \text{ eV}$$

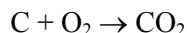
Príklad 4. Koľko energie by sme potrebovali na to, aby sme previedli 1 g atomárneho vodíka zo základného stavu do prvého excitovaného stavu?

Riešenie. Podľa obr. 2.14 vidíme, že rozdiel energie medzi základným stavom atómu vodíka a jeho prvým excitovaným stavom je $(-3,4 \text{ eV}) - (-13,6 \text{ eV}) \approx 10 \text{ eV}$. Jeden gram atomárneho vodíka obsahuje zhruba $6 \cdot 10^{23}$ atómov. Potrebujeme teda energiu

$$10 \cdot 6 \cdot 10^{23} \text{ eV} \approx 10^6 \text{ J}$$

Príklad 5. Skúste odhadnúť výhrevnosť uhlia.

Riešenie. Pri chemických reakciách nastávajú zmeny v energetických hladinách atómov, ktoré sa na reakcii zúčastňujú. Z tabuľky energetických hladín v atóme vodíka vidno, že rozdiely medzi energetickými hladinami sú rádovo niekoľko eV. Pri horení uhlia prebieha reakcia



a možno očakávať, že pri vzniku jedinej molekuly sa uvoľní niekoľko eV. Zoberme pre kvalitatívnu orientáciu 2 eV. V 1 kg uhlia je $6 \cdot 10^{23}/12$ atómov uhlíka (atómová hmotnosť uhlíka je 12). Energia uvoľnená pri spálení 1 kg preto bude približne

$$E = 0,5 \cdot 10^{26} \cdot 2 \text{ eV} = 0,5 \cdot 10^{26} \cdot 3,2 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 16 \cdot 10^6 \text{ J}$$

Výsledok rádovo súhlasí so skutočnosťou: čierne uhlie má $27 \cdot 10^6 \text{ J}$, antracit o 20 % viac, hnedé uhlie o dajakých 30 % menej. Z výsledku vidno, že sme energiu uvoľnenú pri zlučovaní trochu podcenili. To nám ale práve teraz veľmi neprekáča, lebo sme chceli len približný, rádový odhad.

Poznámka. Z predchádzajúcich príkladov vidno, že meraním makroskopických veličín, ako napr. tepla potrebného na vyparenie istého množstva látky a pomocou Avogadrovej konštanty, sa môžeme dozvedieť niečo o takej závažnej veličine atómovej fyziky, ako je väzbová energia jednotlivých látok.

Uvádzame tu tabuľku³¹ väzbových energií niektorých látok.

Látka	Energia väzby
tuhý argón	0,08 eV/atóm
tuhý metán	0,1 eV/molekulu
voda	0,36 eV/molekulu
kovový sodík	1,1 eV/atóm
kuchynská soľ	3,28 eV/atóm
diamant	7,4 eV/atóm

Pri pohľade na takúto tabuľku vznikajú prirodzene otázky o príčinách veľkých rozdielov medzi jednotlivými energiami väzby. Tieto rozdiely sú dané rozdielmi v štruktúre atómov a v ich vzájomných pôsobeniach. A to je jedna z otázok, ktorými sa úspešne zaoberá súčasná kvantová teória.

Faradayov náboj a všetko, čo s ním súvisí, sa preberá podrobne v gymnaziálnych učebniciach fyziky. Uvedieme preto na ukážku iba jeden príklad, ktorý je priamo z učebnice pre III. ročník.

Príklad 6. Koľko medi sa vylúči z roztoku CuSO_4 za tri dni prúdom 10 A?

Riešenie. V roztoku je meď ako dvojmocný ión Cu^{++} . Na vylúčenie 1 kilomólu medi, t. j. okolo $M = 63,5 \text{ kg}$ treba potom dvojnásobok Faradayovho náboja $F = 96\,520 \text{ kC/mol}$. Jeden deň má $3\,600 \cdot 24 = 86\,400$ sekúnd, tri dni majú zhruba $2,6 \cdot 10^5 \text{ s}$ a pri prúde 10 A pretečie za celý čas náboj $Q = 2,6 \cdot 10^6 \text{ C}$. Spolu sa teda vylúči

$$\frac{Q}{2F} M = \frac{2,6 \cdot 10^6}{2 \cdot 96,5 \cdot 10^6} 63,5 \text{ kg} = 0,86 \text{ kg}$$

* * *

Informácie o pomere náboja a hmotnosti elektrónu pochádzali historicky z pokusov s pohybom elektrónov v elektrických a magnetických poliach. Dnes, keď náboj aj hmotnosť elektrónu dobre

³¹ Tabuľka je prebraná z knihy A. Beiser: Úvod do moderní fyziky, Academia, Praha 1975, kde sa možno dozvedieť aj ďalšie veci o energii väzby.

poznáme, možno ich využiť na predpovedanie pohybu elektrónov v elektrických a magnetických poliach. Prípacom týchto javov v našom naozaj každodennom živote je pohyb elektrónového lúča v televízore³².

Príklad 7. Elektrón urýchlíme potenciálovým rozdielom 100 V. Aká bude jeho rýchlosť?

Riešenie. Energia elektrónu bude $E = 100\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-17} \text{ J}$. Energiu možno písať potom ako $mv^2/2$, kde $m = 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ je hmotnosť elektrónu. Porovnaním oboch veličín dostaneme

$$v = \left(\frac{2E}{m} \right)^{1/2} = 0,6 \cdot 10^7 \text{ m/s}$$

čo je rovné asi 0,02 rýchlosti svetla. Takýto elektrón môžeme bezpečne považovať za nerelativistický, lebo $v \ll c$.

Príklad 8. Elektrón urýchlený potenciálovým rozdielom 100 V vletí do kondenzátora, ktorého dĺžka je $l = 10 \text{ cm}$, vzdialenosť platní je $d = 10 \text{ cm}$ a rozdiel potenciálov na platniach $U = 30 \text{ V}$. Aká bude výchylka elektrónu od pôvodného smeru rovnobežného s platňami? (Pozri obr. 2.16.)

Riešenie. Rýchlosť elektrónu v poznáme už z predchádzajúceho príkladu. Cez kondenzátor s dĺžkou l preletí elektrón za čas

$$t = \frac{l}{v}$$

Vnútri kondenzátora naň bude pôsobiť sila eE , ktorá mu udeľuje zrýchlenie v smere osi y rovnajúce sa eE/m . Za čas t nadobudne elektrón v smere osi y rýchlosť

$$v_y = \frac{eE}{m} t = \frac{eE}{m} \frac{l}{v}$$

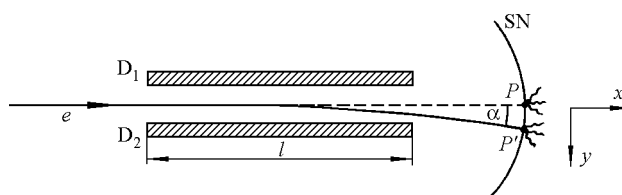
Intenzita elektrického poľa $E = U/d = 300 \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}$. Po dosadení

$$v_y = 0,9 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

Odchýlku od pôvodného smeru by sme určili z podmienky

$$\text{tg } \alpha = \frac{v_y}{v} = 0,15$$

Poznamenajme ešte, že fyzikálne je príklad úplne ekvivalentný vodorovnému vrhu, pri ktorom sa častica pohybuje rovnomerne v smere osi x a rovnomerne zrýchlene v smere osi y (obr. 2.16).



Obr. 2.16. Elektrón prechádzajúci medzi platňami kondenzátora. Platňa D_1 je nabitá záporne, platňa D_2 kladne, SN označuje časť steny sklenenej nádoby, v ktorej je kondenzátor. Bod P je miestom, kde dopadá elektrónový zväzok (t. j. katódové lúče) pri nenabitých platniach, do bodu P' dopadá lúč pri nabitých platniach. V oboch prípadoch možno pozorovať svetielkovanie v bodoch dopadu elektrónového lúča na sklenú stenu trubice

Príklad 9. Elektrón urýchlený potenciálovým rozdielom 100 V vletí do homogénneho magnetického poľa s intenzitou 10^{-4} T . Ako sa bude tento elektrón ďalej pohybovať?

Riešenie. Sila pôsobiaca na nabitú časticu v magnetickom poli je daná výrazom

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

³² Úvahy o spoločenskej zodpovednosti vedcov sú často jednou z „veľkých tém“ rôznych diskusií. Vedecké výsledky ale často poskytujú iba možnosti a využitie týchto možností už nie je v rukách tých, ktorí ich objavili. Sotva možno vedcov, ktorí prišli na to, ako sa elektróny pohybujú v elektrickom poli, brať na zodpovednosť za kvalitu televíznych programov. V iných kontextoch ale otázka je niekedy trochu iná.

kde q je náboj častice. Ak \mathbf{v} a \mathbf{B} sú navzájom kolmé, sila \mathbf{F} bude kolmá aj na \mathbf{v} aj na \mathbf{B} a jej absolútna hodnota (pre elektrón s nábojom $-e$) bude

$$|\mathbf{F}| = evB$$

Ak je sila kolmá na rýchlosť a je konštantná, je to rovnaké ako pri rovnomernom pohybe po kružnici, kde musí pôsobiť dostredivá sila rovná mv^2/r . Elektrón sa skutočne bude pohybovať po kružnici (nebudeme to podrobnejšie zdôvodňovať) a polomer trajektórie bude daný podmienkou

$$\frac{mv^2}{r} = evB$$

Odtiaľ máme

$$r = \frac{mv}{eB}$$

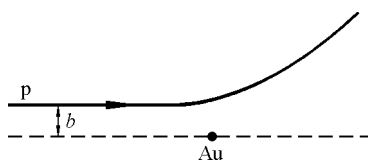
a ak dosadíme všetky veličiny, v SI sústave dostaneme

$$r = \frac{9 \cdot 10^{-31} \cdot 0,6 \cdot 10^7}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^{-4}} = 3,4 \cdot 10^{-1} \text{ m} = 34 \text{ cm}$$

Poznámka: V oboch predchádzajúcich prípadoch bola trajektória elektrónu daná vonkajšími poľami a pomerom e/m , preto možno meraním trajektórie vo vonkajších poliach určiť práve tento pomer.

Príklad 10. Protón s kinetickou energiou $3 \text{ MeV} = 3 \cdot 10^6 \text{ eV}$ prilieta k jadru atómu zlata so zrážkovým parametrom $b = 5,0 \cdot 10^{-13} \text{ m}$. Odhadnite, o aký uhol od pôvodného smeru sa rozptýli.

Návod. Uvažujte podobne ako v článku 3 pri skúmaní Rutherfordovho rozptylu. Presvedčte sa o tom, že v našom prípade môžeme použiť vzťah (1*) z článku 3, pričom namiesto R položíme parameter zrážky b a namiesto náboja $2e$ pre α časticu berieme náboj protónu. Parameter zrážky je naznačený na obr. 2.17.



Obr. 2.17 Parameter zrážky b pre zrážku protónu p s jadrom zlata Au

Príklad 11. Plynný vodík zahriaty na veľmi vysokú teplotu vyžaruje (okrem iného) žiarenie s vlnovou dĺžkou $\lambda = 656 \text{ nm}$, čo je čiara červenej oblasti spektra. Pokúste sa nájsť vysvetlenie.

Riešenie. Energia príslušného fotónu je

$$E = \hbar\omega = 2\pi\hbar\nu = 2\pi\hbar c/\lambda = 1,9 \text{ eV}$$

Podľa obr. 2.14 takáto energia práve odpovedá prechodu zo stavu s energiou E_3 do stavu s energiou E_2 .

Príklad 12. Akú vlnovú dĺžku musí mať žiarenie, ktoré je schopné vyraziť elektrón z atómu vodíka a akú farbu bude mať takéto žiarenie?

Riešenie. Podľa obr. 2.14 potrebujeme na vyrazenie elektrónu z atómu vodíka energiu väčšiu alebo rovnú $13,6 \text{ eV}$. Preto musí platiť

$$\hbar\omega = 2\pi\hbar c/\lambda > 13,6 \text{ eV}$$

a odtiaľ nájdeme $\lambda < 91,2 \text{ nm}$. Takéto žiarenie nevidíme, lebo príslušné vlnové dĺžky ležia v oblasti ultrafialového žiarenia.

Príklad 13. Sklo je priesvitné pre žiarenie s dĺžkami vln z oblasti viditeľného svetla. Skúste nájsť význam tejto skutočnosti z hľadiska atomárnej štruktúry skla.

Riešenie. Fotóny z oblasti viditeľného svetla majú energie $1,6 \text{ eV}$ až $3,3 \text{ eV}$ (presvedčte sa o tom). Takéto žiarenie je silne pohlcované určitým materiálom iba vtedy, ak v ňom existujú stavy s energiami o $1,6 \text{ eV}$ až $3,3 \text{ eV}$ vyššími, ako je základný stav. Takých hladín v skle zrejme niet.

Príklad 14. Anténa vyžaruje na frekvencii 1 MHz (frekvencia $\nu = 10^6 \text{ s}^{-1}$), jej výkon je 1 W. Koľko fotónov je vyžiarených za 1 s?

Príklad 15. Žiarovka s výkonom 40 W je zavesená na lúke na strome vo vzdialenosti 1 km od nás. Odhadnite počet fotónov, ktorý nám padne do oka za 1 s!

Príklad 16. Nájdite energiu fotónu s vlnovou dĺžkou $\lambda = 582,6 \text{ nm}$. Takéto svetlo vzniká v sodíkovej výbojke.

Príklad 17. Molekula CO absorbuje silne žiarenie s frekvenciou $\nu = 1,153 \cdot 10^5 \text{ MHz}$ (mikrovlnná oblasť). Ako to možno vysvetliť?

Riešenie. Energia fotónu prislúchajúca tejto frekvencii, je

$$E = 2\pi\hbar\nu = 4,5 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

Výsledok interpretujeme tak, že nad základnou hladinou molekuly CO leží druhá hladina, ktorá má energiu o $4,5 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$ vyššiu ako základná hladina.

Doteraz sme videli, že preskupenia elektrónov v atómoch a molekulách spôsobujú energetické rozdiely rádovo 1–10 eV. Malá hodnota energie E v ostatnej rovnici potom asi odpovedá tomu, že spomínané dva stavy sa neodlišujú usporiadaním elektrónov, ale niečím iným.

Skutočne, molekula CO vo vyššom zo spomínaných stavov rotuje okolo osi kolmej na spojnicu stredov atómov C a O. Malý rozdiel energií je daný malou energiou tohto rotačného pohybu. To, že spektrálna čiara je ostrá, ukazuje, že aj tento rotačný pohyb je kvantovaný.

Príklad 18. Experiment ukazuje, že pri sodíku nastáva fotoelektrický jav len vtedy, ak naň dopadá svetlo s vlnovou dĺžkou menšou ako $\lambda_0 = 539 \text{ nm}$. Vypočítajte výstupnú prácu pre sodík! Akú rýchlosť majú elektróny, ktoré vyletujú zo sodíkovej katódy, ak ju osvetlíme modrým svetlom ortuťovej výbojky? Toto svetlo má vlnovú dĺžku $\lambda = 436 \text{ nm}$.

Príklad 19. V r. 1916 urobil Millikan presné merania Planckovej konštanty h štúdiom fotoelektrického javu na sodíkovej katóde (výsledky boli publikované v časopise *The Physical Review*, zväzok 7, str. 355., r. 1916). Na sodík dopadalo svetlo rôznych vlnových dĺžok a energia uvoľnených elektrónov sa merala tak, že sa merala napätie na mriežke potrebné na ich zabrzdenie. V nasledujúcej Millikanovej tabuľke sú vlnové dĺžky dopadajúceho svetla a príslušné kinetické energie elektrónov uvoľnených z katódy.

$\lambda \text{ (nm)}$	$E_{\text{kin}} \text{ (eV)}$
312,5	2,128
365	1,595
404,7	1,215
433,9	1,025
546,1	0,467

Zostrojte graf závislosti energie dopadajúcich fotónov od energie vyrazených elektrónov a nájdite odtiaľ hodnotu Planckovej konštanty a výstupnej práce pre sodík. Vychádzajte z Einsteinovho vzťahu

$$\hbar\omega = 2\pi\hbar c/\lambda = E_{\text{kin}} + A$$

kde A je výstupná práca. Pre kontrolu určite \hbar , A z prvého a posledného údajov v tabuľke.

Príklad 20. Elektromagnetické žiarenie, dnes dobre známe a hojne používané v technických aplikáciách, pokrýva obrovskú oblasť frekvencií a dĺžok vln. Podľa dĺžky vln delíme žiarenie zhruba takto:

Názov	Dĺžka vlny
– dlhé vlny	viac ako 1 000 m
– rozhlasové vlny s amplitúdovou moduláciou	50 m – 1 000 m
– televízne vlny a rozhlasové vlny s frekvenčnou moduláciou	0,5 m – 50 m
– mikrovlny	$10^{-3} \text{ m} - 0,5 \text{ m}$
– infračervené žiarenie	$7, 6 \cdot 10^{-7} \text{ m} - 10^{-3} \text{ m}$
– viditeľné svetlo	$3, 6 \cdot 10^{-7} \text{ m} - 7, 6 \cdot 10^{-7} \text{ m}$
– ultrafialové žiarenie	$10^{-8} \text{ m} - 3,6 \cdot 10^{-7} \text{ m}$
– röntgenové žiarenie	$10^{-11} \text{ m} - 10^{-8} \text{ m}$
– gama žiarenie	menej ako 10^{-11} m

Doplňte tabuľku tak, že ku každému riadku uvediete príslušnú frekvenciu (v Hz) a energiu fotónov (v eV).

Porovnajte s tabuľkou uvedenou na vnútornej strane väzby v knihe A. Beiser: *Úvod do modernej fyziky*, Praha : Academia, 2. vydanie, 1978.

Poznamenávame ešte, že hranice medzi jednotlivými oblasťami nie sú pevne stanovené.

2.10 HISTÓRIA SPEKTRÁLNEJ ANALÝZY

V predhistórii kvantovej mechaniky, ktorou sme sa doteraz zaoberali, sú vari najvýznamnejšie dva dátumy: 14. december 1900 a 5. apríl 1913. Prvý dátum označil Arnold Sommerfeld vo svojej knihe *Stavba atómov a spektrálne čiary*³³ za deň zrodu kvantovej teórie. 14. decembra 1900 totiž predniesol Max Planck pred nemeckou fyzikálnou spoločnosťou v Berlíne referát, v ktorom zaviedol univerzálnu konštantu h , pomenovanú po ňom, a určil jej číselnú hodnotu. Druhý dátum, 5. apríl 1913, označuje deň, keď Bohr odoslal na uverejnenie článok O stavbe atómov a molekúl. (Článok vyšiel v júli 1913.)

Už titul spomínaného Planckovho referátu *K teórii zákona rozdelenia energie v normálnom spektre* a doteraz používaný termín Bohrova podmienka frekvencií, ktorú N. Bohr formuloval v r. 1913, svedčia o tom, že spektrálna analýza bola vari najvýznamnejším experimentálnym zdrojom kvantovej teórie. Bude preto užitočné, keď si niečo povieme o histórii spektrálnej analýzy do r. 1913.

Za zakladateľa spektrálnej analýzy treba vlastne považovať Isaaca Newtona, ktorý objavil rozklad svetla hranolom. V samotnom objave nebol Newton natoľko originálny ako v jeho interpretácii. Javy, pri ktorých z bieleho svetla vznikajú farby spektra, opísal aj veľký Newtonov rival Robert Hooke (1635–1703). Veľkú zásluhu na teórii farieb majú aj Francesco Maria Grimaldi (1618–1663) a rektor pražskej univerzity Jan Marcus Marci z Kronlandu (1595–1667). Marci vo svojom spise *Thaumantias*, ktorý vyšiel v roku 1648, uviedol: „... z rôznych lomov nemožno dostať tú istú farbu a naopak, tým istým lomom nemožno získať rôzne farby.“ Tento doslovný preklad z latinčiny by vo voľnejšej citácii znel: „Každá spektrálna farba sa pri svojom vzniku viaže na určitú veľkosť uhla lomu a naopak, každý uhol lomu dáva vznik len určitej farbe.“

Newton šiel však oveľa ďalej: V roku 1672 dokázal, že: 1. farby nevznikajú premenou svetla, ktorá sa odohráva pri lome alebo odraze, ale sú prvotnými, „vrodennými“, vlastnosťami svetla, 2. biele svetlo je zložené zo svetiel rôznych farieb tvoriacich dúhu, 3. svetlo danej spektrálnej farby nemožno už rozložiť a 4. farby prirodzených telies nemajú iný pôvod ako v rôznej schopnosti telies odrážať jeden druh svetla v inom množstve ako druhý.

Prirodzeným dôsledkom Newtonovej teórie farieb, podporenej mnohými dômyselnými experimentmi, bol záver, že nie je nijako možné odstrániť chromatickú chybu šošoviek. Pri lome svetla šošovkami sa biele svetlo tiež rozkladá, vznikajú farebné rozmazané krúžky, ktoré zhoršujú kvalitu zobrazenia ďalekohľadov a iných optických prístrojov.³⁴ Leonhard Euler (1707–1783) však bol presvedčený, že v ľudskom oku našla príroda takú vhodnú kombináciu lámavých optických prostredí, ktorá eliminuje chromatickú chybu jednotlivých šošoviek.

Aj keď Euler nemal celkom pravdu, naznačil cestu, ktorou sa prevažne uberala (a uberá) konštrukcia optických prístrojov. Na Eulerove myšlienky nadviazal ako prvý John Dollond (1706–1761), ktorý vyrobil v r. 1757 achromatický ďalekohľad pre trh. Eulerove myšlienky sprostredkoval Dollondovi, ktorý bol praktikom, Švéd Samuel Klingenstjerna. Možno, že Dollond využil aj práce Chestera Moora Halla, napísané v roku 1727, teda ešte pred Eulerom.

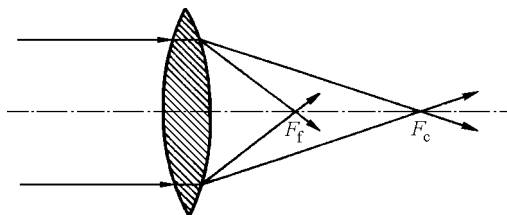
O čo ide pri chromatickej chybe šošoviek a v čom spočíva princíp jej odstránenia?

Na obr. 2.18 dopadá dost' úzky rovnobežný zväzok lúčov na dvojvypuklú šošovku. Ak sú vlnové dĺžky dopadajúcich lúčov takmer rovnaké (hovoríme, že svetlo je monochromatické), sústreďujú sa po prechode šošovkou v jednom bode, ktoré sa nazýva ohnisko. Vzhľadom na to, že sa rôzne farby rôzne lámu, sústreďujú sa lúče rôznych farieb zloženého bieleho svetla v rôznych bodoch. Na našom obrázku

³³ Prvé vydanie tohto syntetického diela o atómovej fyzike vyšlo v Braunschweigu v nakladateľstve Vieweg und Sohn v r. 1919. Sommerfeld sústavne prepracovával svoje kompendium, ktoré vyšlo v mnohých vydaniach v rôznych jazykoch. V ruskom vydaní z r. 1956 nachádzame aj citáciu práce slovenského fyzika Jána Fischera, ktorú spomíname v poznámke na s. 51.

³⁴ To motivovalo Newtona, aby zostrojil namiesto bežne používaného ďalekohľadu so šošovkami zrkadlový ďalekohľad.

je bod F_f ohnisko pre fialovú farbu a F_c ohnisko pre červenú farbu. Dollond a jeho nasledovníci odstránili túto farebnú odchýlku (chromatickú aberáciu) kombináciou dvojjvypuklej šošovky z korunového skla a rozptylky z flintového (oloveného) skla.³⁵



Obr. 2.18

Výroba takýchto šošoviek (presnejšie objektívov) vyžadovala skúsených brusičov a dobrých znalcov optických vlastností rôznych druhov skiel. Vynikajúcim odborníkom v tomto odbore bol Joseph von Fraunhofer. Fraunhofer vynášiel stroj na presné brúsenie šošoviek a zaoberal sa vývojom hodnotných druhov optického skla vhodných na výrobu achromatických šošoviek. Pri výskume optických vlastností svojich skiel pomocou spektra objavil v slnečnom spektre tmavé čiary, pomenované po ňom.

Fraunhoferovi neprináleží prvenstvo v samotnom objave tmavých čiar v slnečnom svetle. Tie objavil anglický chemik a lekár William Hyde Wollaston (1766–1828), ktorý zostrojil v r. 1802 hranolový spektrograf so štrbinou a objavil v spektre Slnka niekoľko tmavých čiar. Myslel si ale, že sú to nejaké chyby v skle alebo v iných častiach prístroja a ďalej sa o ne nezaujímal.

Fraunhofer postupoval oveľa systematickejšie. Osem najvýraznejších tmavých čiar označil písmenami abecedy A až H a určil ich vlnovú dĺžku. Vcelku identifikoval vyše 500 tmavých čiar v slnečnom spektre a našiel podobné čiary aj v svetle iných hviezd. Právom ich nazývame Fraunhoferovými čiarami. Fraunhofer ešte predtým zistil, že v spektre liehovej lampy je jasná žltá čiara (presnejšie dve čiary tesne pri sebe). Ukázalo sa, že na tom istom mieste sú v spektre Slnka tmavé čiary označené D_1 , D_2 . Systematický výskum s prístrojmi, na tie časy mimoriadne presnými, priviedol v r. 1815 Fraunhofera k presvedčeniu, že tmavé čiary nespôsobujú chyby v skle alebo v prístrojoch, ale že to sú regulérne súčasti spektra Slnka a iných hviezd.

Význam týchto objavov bol jasný až neskôr. William Swan v r. 1857 zistil, že žltá čiara v spektre liehovej lampy odpovedá sodíku, ktorý je aj tam prítomný v stopovom množstve. (Žltá čiara sodíka je taká výrazná, že pomocou nej možno dokázať prítomnosť kuchynskej soli, ak je zmiešaná s inými soľami v pomere 1 : 2 500 000.)

Kľúčovými postavami v dejinách spektrálnej analýzy sú chemik Robert Wilhelm Bunsen a fyzik Gustav Robert Kirchhoff. Bunsen podobne ako iní chemici analyzoval v päťdesiatych rokoch minulého storočia rôzne soli pomocou zafarbenia plameňa pri ich žíhaní. Na Kirchhoffovo odporúčanie skúmali potom zafarbené svetlo pomocou spektrografu, ktorý si sami vyhotovili. Kirchhoff a Bunsen týmto prístrojom potvrdili, že žltá čiara sodíka splyva s Fraunhoferovými D-čiarami. Aby odstránili tieto tmavé čiary v spektre Slnka, postavili pred štrbinu spektrografu liehový kahan, v plameni ktorého žihali kuchynskú soľ. Na ich prekvapenie však D-čiary ešte viac stmaveli. Podľa Kirchhoffa to bol „alebo nezmysel, alebo veľká vec“.

Kirchhoff potom vyslovil hypotézu, podľa ktorej studený sodíkový plameň pohlcuje žltú čiaru sodíka zo slnečného svetla. Spolu s Bunsenom hneď aj urobili pokus, ktorým to dokázali. Horúcim plynovým plameňom rozžhali oxid vápenatý do biela³⁶ a svetlo nechali dopadnúť na štrbinu spektroskopu. Keď pred štrbinu spektroskopu postavili studený liehový plameň, v ktorom žihali kuchynskú soľ, získali Fraunhoferove tmavé D-čiary. Tak dokázal Kirchhoff, že Fraunhoferove čiary vznikajú absorpciou svetla niektorými prvkami v slnečnej atmosfére. Kirchhoff a Bunsen získali v pozemských podmienkach aj absorpčné čiary, ktoré sa v slnečnom spektre nenachádzajú (napríklad tmavú čiaru na mieste červenej čiaru lítia).

³⁵ Táto kombinácia pri malej hrúbke rozptylky pôsobí ako spojná šošovka bez chromatickej aberácie. Platí to, pravda, len pre veľmi úzky zväzok skutočne rovnobežných lúčov za predpokladu, že brusič skla odviezol skutočne dobrú prácu.

³⁶ Na tomto princípe sa dodnes vyrába biele svetlo pomocou pančušík z oxidu zirkónia a propán-butánových bômb, vybavených vhodnými rúrkami s ventilom, ktorým sa reguluje prívod plynu.

Vlnové dĺžky emisných aj absorpčných spektrálnych čiar sú charakteristické pre prítomnosť prvku v zlúčenine bez ohľadu na druh zlúčeniny, množstvo prvku v nej, použitý plameň a jeho teplotu. Spektrálna analýza je dodnes jednou z najjemnejších metód kvalitatívnej chemickej analýzy.³⁷ Kirchhoff a Bunsen sami pomocou spektrálnej analýzy objavili dva prvky, a to cézium a rubídium. Prvý pomenovali podľa charakteristickej modrej farby viacerých jeho spektrálnych čiar, druhý podľa tmavočervených čiar. Kirchhoff a Bunsen ďalej zistili; že veľký počet absorpčných (Fraunhoferových) čiar v slnečnom spektre je spôsobený prítomnosťou železa v slnečnej atmosfére. Dokázali prítomnosť ďalších 14 prvkov na Slnku a s veľkou pravdepodobnosťou predpokladali aj existenciu zlata v slnečnej atmosfére. Neskôr bolo pomocou spektrálnej analýzy objavené hélium – najprv na Slnku (Helios) a potom aj na Zemi.

Do čias Galilea Galileiho rozlišovali fyziku neba a fyziku Zeme a ani Galilei sa celkom dôsledne s týmto názorom nerozišiel. Pokiaľ ide o mechaniku, dokázal existenciu jednotných zákonov pre nebeské a pozemské telesá Isaac Newton. V náuke o elektrine urobil tento krok Benjamin Franklin, ktorý „vyrval nebu blesk“! Pokiaľ ide o chemické zloženie, zjednotili nebeské telesá a Zem Bunsen a Kirchhoff. Svojimi výskumami založili nové odvetvie astronómie, astrofyziku. Kirchhoff dokázal, že Slnko pozostáva z veľmi horúceho jadra, ktoré je pravdepodobne tekuté a je obklopené vrstvou obsahujúcou o niečo chladnejšie pary prvkov, nachádzajúcich sa na ňom.

Veľký záujem o nový vedný odbor – astrofyziku, najmä o praktické problémy osvetlenia a výroby vhodných štandardov pre fyzikálne merania,³⁸ aj požiadavky chemickej analýzy, podnietili nebyvalý rozvoj spektroskopie.

Ako postupuje chemický laborant pri kvalitatívnej analýze vzorky nejakej zliatiny pomocou spektrálnej analýzy? Vloží vzorku do žiary uhlíkového oblúka, kde sa mu nepatrné množstvo kovov vyparí. Svetlo prejde cez spektrograf, kde sa na filme objavia spektrálne čiary. Po vyvolaní filmu získa obraz veľkého počtu silnejších a slabších spektrálnych čiar, v ktorých na prvý pohľad nenájde nijakú pravidelnosť. Našťastie má k dispozícii na podložke na stole vzor, kde sú vyznačené len čiary železa s príslušnými vlnovými dĺžkami. V každej zliatine, prakticky v každom kúsku kovu (napr. aj v snubnom prsteni) sú aspoň stopy železa s množstvom charakteristických čiar. Keď si laborant premietne svoj vyvolaný film na štandard s čiarami železa tak, aby sa mu jeho čiary železa a čiary na štandarde s označenými vlnovými dĺžkami kryli, môže na priloženej stupnici určiť vlnové dĺžky všetkých neznámych čiar.

Skúsený laborant podľa niektorých charakteristických výraznejších čiar spozná prítomnosť ďalších prvkov vo vzorke. Má na to tabuľku a vôbec nemusí vedieť, či sú spektrálne čiary niektorého prvku rozmiestnené podľa nejakého systému, a ak áno, či tento systém súvisí so štruktúrou atómu daného prvku. Fyzikov však práve zaujímajú odpovede na tieto dve otázky.

Prvá odpoveď na prvú otázku prišla z miesta, odkiaľ ju nikto nečakal. V roku 1884 si 60-ročný učiteľ matematiky na dievčenskej strednej škole v Bazileji vo Švajčiarsku Johann Jakob Balmer všimol, že čiary vodíkového spektra sa zhromažďujú až k hrane s vlnovou dĺžkou blízkou 365 nm: Napísal si vlnové dĺžky všetkých vodíkových čiar a snažil sa v nich nájsť nejakú pravidelnosť. Skúšal, skúšal, až napokon 25. júna 1884 referoval miestnej Spoločnosti prírodovedcov v Bazileji, že objavil empirický zákon pre vlnové dĺžky vodíkového spektra

$$\lambda = \text{konšt} \cdot \frac{m^2}{m^2 - n^2}, \quad m, n \text{ sú cele kladné čísla}$$

Pre $n = 2$ a $m = 3, 4, 5, \dots$ jeho vzorec súhlasil s experimentálnymi údajmi. Na jeho počesť je táto séria spektrálnych čiar vodíka (vo viditeľnej oblasti) pomenovaná Balmerovou sériou. Neskôršie sa zaužíval jednoduchší zápis Balmerovej série v tvare

$$\nu = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad \text{kde } n = 1, 2, 3, \dots \text{ a } m = n + 1, n + 2, n + 3, \dots$$

V tomto vzťahu $R = 3,286\,9 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ a ν označuje frekvencie, prislúchajúce k jednotlivým čiarom v spektre vodíka. Konštanta R sa nazýva Rydbergova konštanta na počesť Švéda Rydberga, ktorý našiel

³⁷ Z intenzity spektrálnych čiar sa robia závery aj o kvantitatívnom zastúpení nejakého prvku v zlúčeninách a zmesiach

³⁸ V sústave SI sú spektrografické merania podkladom na určenie fyzikálnej jednotky času.

v r. 1890 empirické vzťahy pre spektrá alkalických kovov. Rydbergov (a pochopiteľne aj Balmerov) vzťah možno prepísať aj ako

$$\nu = T_n - T_m$$

kde³⁹

$$T_n = \frac{R}{n^2}, \quad T_m = \frac{R}{m^2}$$

Švajčiar Ritz potom ukázal, že nielen vodíku a alkalickým kovom, ale každému atómu možno priradiť systém termov T_i , $i = 1, 2, 3, \dots$, tak, že každá frekvencia, ktorá sa posudzuje v čiarovom spektre atómu, sa dá zapísať ako rozdiel dvoch termov $T_i - T_k$.

Pokiaľ ide o vodíkový atóm, prekvapenie prišlo v roku 1908, keď Paschen objavil sériu spektrálnych čiar v infračervenej oblasti, vyhovujúcich Balmerovmu vzťahu pre $n = 3$ a $m = 4, 5, 6, \dots$

Už po uverejnení Bohrovho článku v r. 1914 Theodore Lyman (1874–1954) objavil v ultrafialovej oblasti spektrálne čiary ďalšej vodíkovej série pre $n = 1$, $m = 2, 3, 4, \dots$. Ukázalo sa teda, že Bohr sa šťastne orientoval na Balmerov empirický vzorec, keď budoval svoj model atómu vodíka.

Bohr spočiatku nevenoval pozornosť spektrám, považoval ich za príliš komplikované na to, aby poskytli informáciu o štruktúre atómu. Vo februári r. 1913 ho navštívil Hans Marius Hansen, ktorý po návrate zo študijného pobytu v Göttingene písal v Kodani svoju doktorskú dizertáciu. Hansen upozornil Bohra na jednoduché empirické vzťahy v Rydbergových prácach. Bohr si potom prečítal Starkovu knihu z r. 1911 (*Princípy atómovej dynamiky II – Elementárne žiarenie*), kde bol Balmerov vzorec zapísaný v tvare

$$\nu = \text{konšt} \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Bohr v tomto vzťahu našiel potvrdenie svojej podmienky frekvencií

$$h \nu_{nm} = E_n - E_m$$

odkiaľ

$$\nu_{nm} = \frac{E_n}{h} - \frac{E_m}{h}$$

Bohr potom rýchlo dokončil výpočty, v ktorých sa na tento vzťah odvolal, takže už 6. marca 1913 mohol poslať Rutherfordovi prvú kapitolu práce o stavbe atómov a molekúl.

Teoretické vysvetlenie ďalšieho bohatého experimentálneho materiálu, ktoré sa nazhromaždilo v prvej štvrtine dvadsiateho storočia, muselo potom čakať v podstate až na vznik kvantovej mechaniky.

* * *

V tomto článku sme naznačili cestu od Newtona cez Fraunhofera po Bohra, pričom sme poukázali na to, že kľúčovými osobnosťami v tejto histórii sú Bunsen a Kirchhoff. Kirchhoff zohral kľúčovú úlohu aj na ceste, ktorá viedla k Planckovmu objavu univerzálnej konštanty h a ku kvantovaniu energie. Rozhodujúci pri tom bol Kirchhoffov objav, že Fraunhoferove čiary sú vlastne absorpčnými spektrami niektorých prvkov. Tento objav ho podnietil k tomu, aby teoreticky skúmal vzťah medzi vyžarovaním a pohlcovaním svetla látkou. Domnieval sa pritom, že pomocou teórie tepelného žiarenia sa dokáže, prečo sa zhodujú vo vlnových dĺžkach emisné a absorpčné spektrá ľubovoľného prvku. Táto domnienka sa nepotvrdila, ale svojím teoretickým výskumom absorpcie a emisie svetla a tepelného žiarenia Kirchhoff nevdojak nastúpil púť, ktorá sa zakončila v roku 1900 formuláciou Planckovho zákona žiarenia.

Kirchhoff pomocou dômyselných myšlienkových experimentov ukázal, že podiel emisnej a absorpčnej mohutnosti látky je univerzálnou konštantou, ktorá závisí len od absolútnej teploty a vlnovej dĺžky vyžiareného a pohlceného svetla, ale nezávisí od chemického zloženia a iných charakteristík látky. Pritom emisná mohutnosť je energia, vyžiarená za jednotku času z jednotkovej plochy látky do jednotkového

³⁹ Neskoršie zaviedli aj komplikovanejšie výrazy typu $T_n = R/(n - \alpha)^2$.

priestorového uhla. Absorpčná mohutnosť je podiel pohltenej energie k energii, ktorá na teleso dopadla. Tento podiel je menší ako jedna, ak sa časť žiarenia odrazí od povrchu telesa alebo cez priehľadné teleso prejde. Teleso, ktoré pohltí všetko naň dopadajúce žiarenie, teda s absorpčnou mohutnosťou rovnajúcou sa jednej, nazval Kirchhoff absolútne čiernym telesom. Ukázal tiež, že absolútne čierne teleso možno simulovať dutinou s malým otvorom. Lúč, ktorý vnikne do dutiny, sa odráža neustále od jej stien, pravdepodobnosť, že (ten istý lúč) zase z dutiny vyjde, je zanedbateľne malá. Kirchhoff ďalej ukázal, že pri danej konštantnej teplote T stien dutiny energia žiarenia v dutine zostane konštantná. Pomocou druhej termodynamической vety možno ľahko dokázať, že konštantné zostane aj rozdelenie energie dutinového žiarenia na jednotlivé vlnové dĺžky. Ostalo už „iba“ určiť, ako je energia dutinového žiarenia rozdelená na jednotlivé farby, prípadne, koľko energie pripadne na neviditeľnú infračervenú a takisto neviditeľnú ultrafialovú oblasť. Inými slovami, treba nájsť funkciu $\phi(\lambda, T)\Delta\lambda$, ktorá určuje energiu žiarenia pripadajúcu pri danej teplote T na vlnové dĺžky z intervalu od λ po $\lambda + \Delta\lambda$, pričom $\Delta\lambda$ je veľmi malý interval. Energia žiarenia z uvedeného intervalu, vyžiarená za jednotku času cez malý otvor do polpriestoru, sa líši od energie $\phi(\lambda, T)\Delta\lambda$, len konštantným faktorom. To isté platí aj pre rovnako veľkú pohltenu energiu. Teda ozaj išlo „iba“ o určenie tvaru funkcie $\phi(\lambda, T)\Delta\lambda$, čo označil Kirchhoff vo svojom článku v roku 1860 za „úlohu nanajvýš dôležitú“. Trvalo takmer 40 rokov, kým experimentátori mohli nakresliť na základe svojich meraní graf Kirchhoffovej funkcie aspoň pre oblasť krátkych vln (pozri obr. 2.8) a plných 40 rokov, kým Max Planck napísal vzťah pre Kirchhoffovu funkciu, ktorý bol experimentálne overený pre celé spektrum, a ďalšie dva mesiace, kým tento vzťah teoreticky zdôvodnil. A stalo sa to, čo neočakávali ani Kirchhoff, ani Planck, ani početní ďalší fyzici, ktorí sa uvedeným problémom zaoberali: Teoretické zdôvodnenie Kirchhoffovej funkcie, nazývané teraz Planckovým rozdeľovacím zákonom, bolo možné len za predpokladu, že látka nevyžaruje energiu spojito, ale po diskretných kvantách.

* * *

Históriu spektrálnej analýzy sme tu uviedli preto, aby bolo vidno, že fyzikálne poznanie, v čase, keď je snáď najzaujímavejšie a najprítlačivejšie, nie je deduktívnym postupom, ale často tápaním v tme alebo v pološere. Čitateľ s hlbším záujmom o fyziku nájde niektoré ďalšie podrobnosti v knihách, ktoré vyšli vo vydavateľstve Alfa: L. I. Ponomariov: *Z druhej strany kvanta* (1979) a S. R. Filonovič: *Lúče, vlny, kvantá* (1987).

2.11 POSTAVY, O KTORÝCH SA PÍŠE V DRUHEJ KAPITOLE

Benjamin Franklin sa narodil 17. januára 1706 v Bostone ako sedemnásťročný dieťa mydlára. Vyučil sa za knihtačiara a niečo vyše dvadsaťročný vlastnil malú tlačiareň vo Filadelfii. Neskôr vydával noviny a almanach, založil vo Filadelfii požiarny zbor, knižnicu, univerzitu a filozofickú spoločnosť. V roku 1737 sa stal poštmajstrom v rodnom meste a o 16 rokov neskôr bol v Londýne generálnym poštmajstrom britských kolónií v Amerike. Rozišiel sa však s britskou koloniálnou vládou a vrátil sa do Ameriky.

V roku 1776 bol spolusignatárom slávnej *Deklarácie nezávislosti* zo 4. júla 1776. V tom istom roku odchádza ako vyslanec USA do Paríža. Do vlasti sa vrátil v r. 1785.

Vo fyzike bol Franklin samoukom. V rokoch 1747–1754 sa preslávil úspešnými experimentmi, dokázal elektrickú povahu blesku a totožnosť atmosférickej a zemskej elektriny. V tom čase to bol obrovský poznatok, ktorý podstatne prispel k vytváraniu jednotného obrazu sveta. Bol síce menej významný, ale predsa len príbuzný s Newtonovým objavom totožnosti sily (t. j. gravitácie), spôsobujúcej pád jablka zo stromu aj pohyb Mesiaca okolo Zeme či planét okolo Slnka. V roku 1750 vynášiel bleskozvod. Zaoberal sa vedením tepla v kovoch, šírením zvuku vo vode a ďalšími fyzikálnymi problémami. Bol prvým významným Američanom v dejinách fyziky. Prijali ho za člena londýnskej Royal Society, Sankt-Petersburskej Akadémie, aj Parížskej Akadémie vied. Keď ho prijímali za člena poslednej, D'Alembert ho uviedol slovami: „Vyrval nebu blesk a tyranom žezlo“. Benjamin Franklin zomrel vo Filadelfii 17. apríla 1790.

John Dalton sa narodil 6. septembra 1766 v Eaglesfiede v Anglicku. V roku 1798 spolu s Youngom opísal zrakový defekt, ktorý na sebe pozoroval. Neskôr pomenovali tento defekt daltonizmus (farbosleposť). Hlavnú pozornosť venoval teórii plynov a chemickému zlučovaniu. V roku 1801 objavil zákon

parciálnych tlakov plynov, podľa ktorého celkový tlak zmesi plynov rovná sa súčtu tlakov jednotlivých zložiek, ak by každá z nich bola sama v nádobe. V roku 1803 ukázal, že plyny sa rozpúšťajú v kvapalinách v závislosti od ich parciálnych tlakov (Daltonov zákon). V roku 1802 nezávisle od Gay-Lussaca ukázal, že pri konštantnom tlaku rastie objem ideálneho plynu priamo úmerne s absolútnou teplotou. Koeficient úmernosti je pritom pre všetky plyny rovnaký.

John Dalton bol horlivým stúpencom Demokritovho atomizmu a snažil sa ho aplikovať v modernej chémii. Bol presvedčený, že zlučovanie prvkov sa deje na atomárnej úrovni, a to tak, že sa látky vždy po jednom atóme zlučujú na zložitejšie častice, z ktorých sa skladajú zlúčeniny. Podľa Daltona mala voda vzorec HO a nie H₂O. (Dalton označoval vodík značkou *H* a kyslík značkou *O*, vodu značkou *HO*).

Pochopiteľne, atómové hmotnosti, ktoré Dalton určil, boli v dôsledku toho zväčša nesprávne, ako to vidno z tejto tabuľky:

	Podľa Daltona	Súčasná hodnota
vodík	1	1,008
kyslík	6,5	16 (presne 15,9994)
dusík	5	14,007

Čitateľ si iste všimol, že Daltonove hodnoty sú zaťažené aj chybami merania.

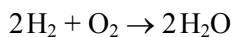
Daltonov nesprávny predpoklad o tom, že na zlučovaní sa zúčastňujú atómy rôznych látok väčšinou po jednom, nič nemení na prevrate, ktorý urobil v chémii formulovaním zákona o stálych hmotnostných pomeroch látok, ktoré vstupujú do chemických reakcií. V Manchestri, kde pôsobil ako profesor, si ho veľmi vážili, do vestibulu univerzity umiestnili jeho bustu, ešte kým žil. Zomrel v Manchestri 27. júla 1844.

Joseph Louis Gay-Lussac narodil sa 6. decembra 1778 v Saint Léonarde. Bol profesorom na École polytechnique a na Sorbonne v Paríži. V roku 1802 určil koeficient tepelnej rozťažnosti ideálnych plynov. Uskutočnil po Charlesovi prvé vedeckovýskumné výstupy v balóne (prvý spolu s J. B. Biotom, druhý sám). V roku 1807 určil zmenu teploty vzduchu pri adiabatických procesoch. Zomrel 9. mája 1850 v Paríži.

Gay-Lussac na rozdiel od Daltona neskúmal hmotnostné pomery prvkov v chemických zlúčeninách, ale objemové, ktoré sú pre ideálne plyny veľmi jednoduché. Zistil napríklad, že vodík zhorí bezo zvyšku na vodu, ak použil presne dvojnásobné objemové množstvo vodíka ako kyslíka. Ukázal ďalej, že vodná para, ktorá takto vznikne, zaujme pri danej teplote a tlaku ten istý objem ako predtým iba vodík. Podobné jednoduché objemové pomery určil pre plyny NO, N₂O₃, SO₂, HCl, NH₄Cl.

Amadeo Avogadro, gróf di Quaregna e Cerretto narodil sa 9. augusta 1776 v Turíne. Vyštudoval právo, ale potom sa venoval fyzike a matematike. Bol dlhé roky profesorom fyziky na Turínskej univerzite. Zomrel v Turíne 9. júla 1856.

Avogadro ako prvý podal teoretickú interpretáciu Gay-Lussacových experimentov na základe molekulovej hypotézy, ktorú ako prvý vyslovil. Opravil tak nezrovnalosti v Daltonových výpočtoch atómových hmotností. V roku 1811 formuloval zákon, podľa ktorého rovnaké objemy rôznych (ideálnych) plynov obsahujú pri danej teplote a tlaku rovnaký počet molekúl. Avogadro nepoužil ešte termín „atómy“ a „molekuly“, ani súčasné používané chemické značky, svojím spôsobom však (na rozdiel od Daltona) ako prvý správne zapísal mnohé chemické reakcie, napríklad



Jeho úvahy nepresadil ani taký slávny učenec, akým bol A. M. Ampère, ktorý ich vysoko ocenil. Ináč zostali vo vedeckom svete celé polstoročie nepovšimnuté.

Jacob Jöns Berzelius narodil sa 20. augusta 1779 vo Wäfersunde vo Švédsku. Zomrel 7. augusta 1848 v Stockholme. Ak Robert Boyle stál pri koliske modernej chémie, Berzeliom sa začínajú jej mužné roky. Rovnako ako Boyle a Dalton bol presvedčeným zástancom atómovej teórie. Označil chemické prvky dodnes používanými symbolmi a za jednotku pomernej atómovej hmotnosti vzal, ako prvý, atómovú hmotnosť kyslíka (položil ju rovnú číslu 100), lebo sa ľahko zlučuje s inými prvkami. Určil atómové hmotnosti vyše 40 chemických prvkov a správne zapísal na základe molekulovej hypotézy vzorce mnohých zlúčenín. (Kde sa mu to nepodarilo, získal aj nesprávne atómové hmotnosti zložiek

týchto zlúčenín.) Pre zaujímavosť uvádzame tabuľku atómových hmotností podľa Berzelia v porovnaní so súčasnými hodnotami, zaokrúhlenými na jedno desatinné číslo:

Prvok	Berzelius 1818	Berzelius 1826	Súčasná hodnota
uhlík	12,12	12,24	12,0
síra	32,3	32,24	32,1
olovo	416	207,4	207,2
ortuť	406	202,8	200,6
meď	129	63,4	63,5
železo	109,1	54,4	55,8
sodík	93,5	46,6	23,0
draslík	157,6	78,5	39,1
striebro	433,7	216,6	107,9

Nesprávne sú atómové hodnoty Na, K, Ag, lebo ich Berzelius spočiatku považoval za štvorväzbové, potom za dvojväzbové.

Prvý upozornil na to, že väzbové sily môžu byť elektrickej povahy. Jeho teória vysvetlila iónovú väzbu, vysvetlenie kovalentnej väzby dalo na seba čakať do vzniku kvantovej mechaniky. Berzeliove názory sa nestretli s dostatočným pochopením, kým D. I. Mendelejev nezostavil periodickú tabuľku prvkov.

Dmitrij Ivanovič Mendelejev sa narodil 8. februára 1834 v Tobolsku ako syn riaditeľa školy. Študoval v Sankt-Peterburgu a v Heidelbergu, bol profesorom v Sankt-Peterburgu a založil metrologický ústav, ktorý teraz nesie jeho meno. Zomrel 2. februára 1907 v Sankt-Peterburgu.

V roku 1869 objavil periodický zákon chemických prvkov a zostavil prvú periodickú tabuľku prvkov. Nadviazal pritom na ešte nejasné Berzeliove úvahy o analógii medzi niektorými chemickými prvkami a o ich mocnosti. Zaujímavé je, ako mu pedagogická činnosť dopomohla k tomuto epochálnemu objavu. Mendelejev hľadal spôsob ako ľahšie objasniť študentom vlastnosti prvkov, aby si ich mohli usporiadať podľa nejakého systému. Napísal prvky na lístky, lístky skladal rôznym spôsobom a napokon zistil, že lístky zložené na spôsob periodickej tabuľky predstavujú zákonitý systém⁴⁰.

D. I. Mendelejev upresnil atómové hmotnosti mnohých prvkov a predpovedal existenciu štyroch ešte neobjavených prvkov. Na jeho počesť pomenovali stoprvý prvok Mendelejevium ($^{257}_{101}\text{Md}$). Zdôvodnenie Mendelejevovej periodickej sústavy prvkov podala tiež až kvantová mechanika.

Michael Faraday sa narodil 22. septembra 1791 v južnom predmestí Londýna (Newington Butts, Surrey) ako tretie dieťa kováča. Po vychodení základnej školy sotva trinásťročný šiel do učenia za knihára. Tak sa dostal do styku s vedeckou literatúrou, bavil sa chemickými pokusmi podľa návodu kníh, ktoré čítal. Neskoršie začal horlivo navštevovať prednášky Humphryho Davyho v Royal Institution, prírodovednej osvetovej ustanovizni, ktorú založil v roku 1800 Benjamin Thompson (gróf Rumford). Napokon prijal sir Humphry Davy v roku 1813 Faradaya za svojho asistenta. V tom istom roku podnikli poldruharočnú cestu po európskom kontinente, na ktorej bol Faraday v jednej osobe komorníkom lady Davyovej, ubytovateľom, sekretárom a Davyho asistentom. Demonstrovali rôzne experimenty a diskutovali o nich s poprednými vedcami tých čias, Ampèrom, Cuvierom, Gay-Lussacom, Humboldtom a inými. Po návrate do Londýna pokračoval Faraday v práci v Royal Institution. V roku 1824 ho zvolili za člena Royal Society, v roku 1825 sa stal riaditeľom laboratória Royal Institution a v roku 1827 profesorom chémie. Zomrel v Hampton Court pri Richmonde ako slávny a vážený muž v 76. roku života dňa 25. augusta 1867.

V roku 1831 objavil Faraday elektromagnetickú indukciu a založil teóriu elektrických a magnetických siločiar, z ktorej vzišla teória elektromagnetického poľa. Faraday zaviedol pojem dielektrika ako nejakej substancie, cez ktorú sa šíria elektrické sily konečnou rýchlosťou od častice k častici. Tým vlastne zaviedol pojem poľa ako fyzikálnej reality. Tak pozmenil Newtonov obraz o svete telies, ktoré pôsobia na seba okamžite na veľké vzdialenosti.

A práve muž, ktorý zavrhol naivnú Demokritovu predstavu o pasívnom prázdnom priestore, rozhodujúcim spôsobom prispel k rozvoju atomizmu. Sformuloval dva zákony elektrolýzy, ktoré nesú jeho meno. Z Faradayových zákonov a Avogadrovoho zákona vyplýva, že náboj prenášaný ľubovoľným

⁴⁰ Voľne citované podľa článku P. Kapicu „Profesor a študent“, uverejnenom v časopise *Kvant* č. 11/1981, s. 2-5.

iónom, je celočíselným násobkom najmenšieho univerzálneho náboja e . Faraday o tom napísal: „Ak prijmeme atómovú teóriu a jej terminológiu, potom z hľadiska chemických procesov navzájom ekvivalentné atómy telies sú vybavené rovnakými množstvami elektriny“.

Treba však dodať, že v ďalšom texte vyjadruje aj určité pochybnosti o atómovej teórii. Tvrdenie o atómovej štruktúre elektriny publikoval až v roku 1881 G. Johnstone Stoney (1826–1911), ktorý v roku 1891 navrhol pomenovať elementárny náboj *elektrónom*. Elektrónovú teóriu v spojení s Maxwellovou teóriou elektromagnetického poľa vypracoval potom na prelome 19. a 20. storočia H. A. Lorentz⁴¹.

Joseph Fraunhofer sa narodil 6. marca 1787 v bavorskom meste Straubingu ako jedenásty (najmladší) syn sklárskeho majstra. Ako dvanásťročný bol už úplnou sirotou. Za tútora mu určili mníchovského výrobcu zrkadiel P. A. Weichselbergera, ktorý mu spočiatku nedovolil ani len v nedel' a sviatočné dni navštevovať učňovskú školu.

Pretože počas napoleónskych vojen sa v Európe prejavil nedostatok kvalitného optického skla, založili v Mníchove v r. 1802 optickú dielňu, ktorá sa čoskoro zreorganizovala na Reichenbachov, Utzschneiderov a Liebherrov Matematicko-mechanický ústav. Fraunhofer v ústave začal v r. 1806 pracovať ako tovariš. V r. 1807 ho Utzschneider preložil do novozriadeného Optického ústavu na výrobu skla a šošoviek do Benediktbeurnu.

Fraunhofer v budove bývalého kláštora v Benediktbeurne vyskúšal stovky experimentálnych taviieb skla. Z rôznych častí skleneného bloku vyrezal a vyleštil hranoly, aby zistil, nakoľko je vyrobené sklo opticky rovnorodé. Jedným hranolom rozložil biele svetlo na jednotlivé farby spektra, takže druhým (skúmaným) hranolom prešlo už (takmer) monochromatické svetlo. Tento druhý hranol vkladal do spektrometra, ktorý si sám zhotovil a ktorým zmeral index lomu skúšaného skla. Pri spektroskopických meraniach treba mať referenčné čiary, pomocou ktorých určujeme vlnové dĺžky svetla, ktoré prešlo spektrometrom. Fraunhofer použil ako referenčné čiary tmavé čiary zo slnečného spektra, ktoré označil prvými písmenami z abecedy. Výhoda tejto metódy bola v tom, že tmavé čiary sú veľmi úzke. (Vtedy ešte nepoužívali elektrický oblúk, pomocou ktorého vytvárame na spektrograme úzke čiary atómov kovov.)

Fraunhofer zhotovil tabuľky indexov lomov rôznych druhov skla a iných látok, ktoré dodnes udivujú svojou presnosťou. V r. 1814 vyšla jeho prvá práca o určení indexov lomov rôznych druhov skiel a využitia týchto poznatkov na výrobu achromatických šošoviek. V tejto práci už dokázal chromatickú chybu ľudského oka, čím vyvrátil Eulerov predpoklad o absolútnej dokonalosti nášho zrakového orgánu. Opísal aj slnečné spektrum, v ktorom napočítal 574 tmavých čiar.

S Wollastonovou prácou sa oboznámil až neskôršie. Po r. 1814 tiež začal študovať Youngove a Fresnelove práce z optiky. Od r. 1819 pôsobil v Mníchove a venoval sa aj iným oblastiam optiky. Konštruoval veľké astronomické ďalekohľady, ktoré našli uplatnenie v Pulkove pri Sankt-Peterburgu, Jurjeve (terajšom Tartu v Estónskej SSR), Cincinnati a v Harvarde (USA). Zaoberal sa difrakciou svetla a objavil použitie mriežok v spektroskopii. V r. 1822 mu univerzita v Erlangene udelila čestný doktorát, neskôršie sa stal čestným občanom Mníchova a bavorský kráľ ho povýšil do šľachtického stavu. Fraunhofer zomrel 7. júna 1826 v Mníchove.

Gustav Robert Kirchhoff sa narodil 12. marca 1824 v Kráľovci (terajšom Kaliningrade) ako najmladší z troch synov justičného radcu Carla Friedricha Kirchhoffa. Po skončení gymnázia študoval v r. 1842–1847, pod vedením zakladateľa fyzikálnej školy v Kráľovci profesora Franza Ernsta Neumanna, na univerzite v Kráľovci.

Na vysokú školu sa zapísal s obavami, trochu sa hanbil za svoj nízky vzrast. Keď si potom nasadil na hlavu vtedy obligátnu študentskú čapicu, často počul na ulici poznámky: „Hľa, aký malý študent!“ Ukázalo sa však, že jeho postava mu neprekážala, aby sa ako 21-ročný poslucháč preslávil prvou vedeckou prácou a aby sa ako 33-ročný oženil s dcérou svojho profesora matematiky, Richelota.⁴²

Tvrdenie, že Kirchhoff sa preslávil ako 21-ročný poslucháč, nie je nijako prehnané. V roku 1845 mu totiž vyšla v časopise *Annalen der Physik und Chemie* prvá vedecká práca *O prechode elektrického prúdu*

⁴¹ Hendrik Antoon Lorentz sa narodil 18. júla 1853 v Arnheme. Od r. 1878 bol profesorom v Leydene. Zomrel 4. februára 1928 v Haarleme. Nobelovu cenu mu udelili v roku 1902. Od r. 1911 bol stálym predsedom Solvayových kongresov. Pred Einsteinom a Bohrom bol vari najväčšou autoritou vo fyzike v medzinárodnom meradle.

⁴² Citované z knihy Danzer, K.: *Robert, W. Bunsen und Gustav R. Kirchhoff*. Leipzig : Teubner 1972, s. 95.

doskou, špeciálne kotúčom. V dodatku k tomuto článku odvodil podmienky rovnováhy Wheatstonovho mostíka, ktoré použil pri experimentálnom overení výsledkov svojich výpočtov. A práve pri určení rovnováhy tohto zariadenia na meranie odporu určil známe Kirchhoffove zákony vetvenia prúdov, ktoré nájde čitateľ v stredoškolských učebniciach rovnako ako opis Wheatstonovho mostíka. Problematike vetvenia elektrického prúdu venoval aj svoju doktorskú dizertáciu v r. 1847.

Kirchhoff po skončení štúdia v Kráľovci odišiel do Berlína, kde sa v r. 1848 habilitoval prácou *Niektoré nové závery z Ohmovho zákona...* V r. 1850 ho povolali za mimoriadneho profesora experimentálnej fyziky na vratislavskú univerzitu. V apríli 1851 prišiel na túto univerzitu chemik Robert Wilhelm Bunsen (1811–1899). Tu sa začalo nerozlučné priateľstvo týchto dvoch významných vedcov. O rok odišiel Bunsen do Heidelbergu. Keď sa tam v r. 1854 uvoľnilo miesto riadneho profesora fyziky, Bunsen zariadil, aby na tento post povolali Kirchhoffa. V Heidelbergu sa plných 21 rokov rozvíjala plodná spolupráca Bunsena a Kirchhoffa. V r. 1875 povolali Kirchhoffa za riadneho profesora teoretickej fyziky do Berlína, kde potom prednášal až do konca života. Zomrel v Berlíne 17. októbra 1887.

Max Planck absolvoval štvrtý ročník svojho vysokoškolského štúdia v Berlíne, kde počúval Helmholtzove a Kirchhoffove prednášky. V r. 1889 nastúpil na miesto, ktoré sa uvoľnilo po Kirchhoffovej smrti a splnil odkaz svojho predchodcu: odvodil zákon spektrálneho rozdelenia energie žiarenia absolútne čierneho telesa.

Kirchhoff pracoval v rôznych oblastiach fyziky, zaoberal sa hydrodynamikou, elektrodynamikou, termodynamikou roztokov, tepelnou vodivosťou, odrazom a lomom svetla v kryštáloch. Najvýznamnejším jeho prínosom pre fyziku je založenie spektrálnej analýzy ako metódy analytickej chémie (spolu s Bunsenom) a formulovanie zákona, v ktorom dokázal; že podiel emisnej a absorpčnej mohutnosti je univerzálnou funkciou iba teploty a vlnovej dĺžky svetla, pohlteneho a vyžiareného ľubovoľnou látkou.

V súvislosti so spektrálnou analýzou spomenieme dve príhody z Kirchhoffovho života. Z listu, ktorý napísal G. Kirchhoff r. 1860 svojmu bratovi vysvitá, že mu raz na prechádzke známy doktor filozofie rozprával o tom, že nejaký blázon tvrdí, že objavil na Slnku sodík. „Pokúšal som sa mu vysvetliť“ – pokračoval Kirchhoff v liste – „že táto úloha nie je taká nemožná... Pritom som ťažko odolával pokúšaniu povedať, že týmto bláznom som ja.“⁴³

Druhú príhodu zreprodukuje z citovanej Danzerovej knihy. Kirchhoffa sa raz jeho bankár pýtal, aký má úžitok z toho, že objavil na Slnku vzácne kovy, dokonca zlato, keď si ho odtiaľ nemôže priniesť. Čoskoro po tomto rozhovore zanesol Kirchhoff svojmu bankárovi do úschovy zlatú Rumfordovu medailu a vyzdvihol si peňažný obnos spojený s týmto vyznamenaním s poznámkou: „Vidíte, predsa len som si dačo priniesol zo zlata Slnka“.

Johann Jakob Balmer sa narodil 1. mája 1825 v Lausene pri Bazileji vo Švajčiarsku. Študoval na pedagogickej škole v Bazileji a na vysokej škole technickej v Karlsruhe. Štúdiá dokončil na berlínskej univerzite. Doktorskú dizertáciu obhájil v r. 1849 prácou o cykloidách na bazilejskej univerzite. Učil spočiatku na pedagogickej škole a potom ako stredoškolský profesor matematiky a krasopisu na dievčenskom lýceu v Bazileji. Popri tom ako súkromný docent, t. j. bezplatne, prednášal deskriptívnu geometriu na bazilejskej univerzite.

George Paget Thomson sa pri svojej návšteve vo Švajčiarsku po prvej svetovej vojne dozvedel, že Balmer sa zaoberal numerológiou, t. j. zaujímal sa o také veci, ako je počet oviec v stáde alebo počet schodov v pyramíde. Jedného dňa pri rozhovore s priateľom (pravdepodobne Eduardom Hagenbachom) Balmer hovoril, že práve nemá čo na práci. Priateľ odpovedal: „Dobre, keď sa zabávaš číslami, prečo sa nepoobzeráš, čo by si mohol urobiť so skupinou čísel; ktoré pochádzajú zo spektra vodíka?“ a udal Balmerovi vlnové dĺžky prvých piatich čiar vodíkového spektra. Takmer 60-ročný Balmer vykúzlil z týchto čísel svoj empirický vzorec. O štyri roky 12. marca 1898 v Bazileji zomrel.

Janne Robert Rydberg sa narodil 8. novembra 1854 v Halmstade vo Švédsku. Študoval na univerzite v Lunde, kde obhájil v r. 1879 doktorskú dizertáciu prácou z matematiky. V roku 1880 začal prednášať matematiku a v r. 1882 fyziku na univerzite v Lunde. V rokoch 1892–1901 pôsobil na fyzikálnom ústave univerzity v Lunde. V r. 1901 sa stal mimoriadnym profesorom a potom riaditeľom fyzikálneho ústavu. Rydberg zomrel v Lunde 28. decembra 1919. V poslednom roku života sa stal zahraničným členom Royal Society v Londýne.

⁴³ Citované podľa Mayer, D.: Príspevek ke genezi Kirchhoffových zákonů. In: *Dějiny vědy a techniky* 9 (1976) č. 1, s. 17-29.

Walther Ritz sa narodil 22. februára 1878 v švajčiarskom meste Sion. Študoval na Konfederálnej vysokej škole technickej v Zürichu matematiku a fyziku v rokoch 1897–1901, bol teda tri roky Einsteinovým kolegom. V rokoch 1901–1903 pokračoval v štúdiách v Göttingene, kde získal doktorát pod vedením Woldemara Voigta (1850–1919), ktorý prvý formuloval nové transformačné vzťahy pre pohybové rovnice elektrodynamiky v inerciálnych vzťažných sústavách. Walther Ritz potom pôsobil v Leydene, Bonne, Paríži a Tübingene, kde spolupracoval s Paschenom. V r. 1909 sa v Göttingene habilitoval. Jeho zdravie však bolo podlomené tuberkulózou, na ktorú 7. júla 1909 v Göttingene zomrel.

Rudolf Emanuel Julius Clausius sa narodil 2. januára 1822 v Koszaline (teraz Poľsko). Študoval v Berlíne, bol profesorom v Zürichu, Wtírzburgu a Bonne. Zomrel 24. augusta 1888 v Bonne.

Clausius patrí medzi najvýznamnejšie postavy v dejinách náuky o teple a matematickej fyziky. Nezávisle od lorda Kelvin – William Thomsona (1824–1907) dokázal, že teóriu tepla možno vybudovať na dvoch základných princípoch overených ľudskou skúsenosťou a nescíselnými pokusmi. Tieto princípy nazval prvou a druhou hlavnou termodynamickou vetou. Ich formulácie nájdeme v stredoškolských učebniciach. Nielen názvy a formulácie týchto princípov, ale aj pojmový aparát termodynamiky a matematické metódy, ktoré sa v tejto disciplíne používajú, pochádzajú od Clausia. Rovnako významnú úlohu zohral Clausius aj vo vývine molekulárnokinetickej teórie plynov⁴⁴, ktorú rozvíjal nezávisle od termodynamiky.

Z priekopníkov molekulárnokinetickej teórie plynov si šťastena histórie vybrala nemeckého chemika Augusta Karla Kröniga (1822–1879), a to práve preto, že jeho prácu z r. 1856 si všimol R. Clausius, ktorý sa v tomto čase už sám zaoberal myšlienkou, že teplo nie je ničím iným ako neusporiadaným pohybom molekúl.

Clausius v stati „O druhu pohybu, ktorý nazývame teplom“ (*Annalen der Physik* 100, 1857, str. 353-380), spresnil a matematicky formuloval Krönigove myšlienky. Clausius v tejto práci odvodil výraz pre kinetický tlak ideálnych plynov a stavovú rovnicu ideálnych plynov spôsobom, ktorý dodnes nachádzame v stredoškolských aj vysokoškolských učebniciach.

Holandský meteorológ C. H. D. Buys-Ballot (1817–1890) podrobil v r. 1858 teóriu ideálnych plynov kritike. Ukázal totiž, že Clausiove výpočty stredných rýchlostí molekúl plynu (niekoľko sto metrov za sekundu) sú v rozpore so skúsenosťou. Ak by sa molekuly voľne pohybovali takouto rýchlosťou, zaplnil by sírovodík alebo chlór, vypustený z fľaše v zlomku sekundy laboratórium bežných rozmerov. Ale plyn, vypustený v jednom kúte miestnosti, pocítíme v protiľahlom kúte až o niekoľko minút. Clausius zachránil kinetickú teóriu plynov tvrdením: áno, molekula sa pohybuje priamočiaro v danom smere veľkou rýchlosťou, ale iba na krátke vzdialenosti, kým sa nezrazí s druhou molekulou (presnejšie, kým sa nedostane do sféry vplyvu odpudivej sily nejakej inej molekuly). Po zrážke s inou molekulou (rozptyle na inej molekule) zmení svoj smer, takže pohyb molekúl v plyne je neusporiadaný, chaotický. Kým molekula priletí na druhý koniec miestnosti, mnohokrát zmení svoj smer, pričom predsa len bude prevládať pohyb častíc na tú stranu, kde je menšia hustota plynu. V konečnom dôsledku bude transport makroskopických vlastností látky oveľa pomalší ako rýchlosť voľnej molekuly.

Clausius svoju teóriu aj matematicky formuloval pomocou nového fyzikálneho pojmu, strednej voľnej dráhy molekuly. Svoje názory uverejnil v druhej práci o kinetickej teórii plynov v roku 1858 pod názvom O strednej dráhe molekúl pri molekulárnom pohybe plynných telies a niekoľko iných poznámok o mechanickej teórii tepla⁴⁵.

James Clerk Maxwell bol mužom, ktorý dovíšil a matematicky formuloval Faradayovu teóriu elektromagnetického poľa. Narodil sa 13. júna 1831 v škótskom Edinburghu, vyrastal však a veľkú časť svojho krátkeho života strávil vo vidieckom rodinnom sídle v Glenlaire. Prvú vedeckú prácu (o konštrukcii oválnych geometrických kriviek) mu uverejnili ako stredoškólakovi. Zaoberal sa rôznymi matematickými a fyzikálnymi problémami, za svoj životný cieľ si však stanovil matematickú formuláciu Faradayovej teórie. Túto prácu uskutočnil v rokoch 1855–1873 v takej dokonalej forme, že štyri zá-

⁴⁴ Spomenuli sme, že myšlienky Daniela Bernoulliho zostali zo začiatku nepovšimnuté. Rovnaký osud postihol práce Johna Herapatha (nar. 1820 v Bristole), ktorý si dovoľil polemizovať s takými uznávanými fyzikmi, akými boli P. S. Laplace (1749–1829) a S. D. Poisson (1811–1842). Jedine James Prescott Joule (1818–1889) nadviazal na Herapathove výsledky, ale na rozdiel od mnohých iných svojich prác s molekulárno-kinetickej teóriou nepochodil. Ešte horšie dopadol John James Waterston (1811–1883), ktorý v r. 1846 verejne prečítal (podľa vtedajších zvyklostí to bola podmienka na uverejnenie) svoju prácu pred Kráľovskou spoločnosťou (Royal Society) v Londýne. Ale prácu ako príliš špekulatívnu za jeho života neuvěřjnili. Vydal ju až v r. 1892 lord Rayleigh, ktorý ju doslova vyhrabal v archíve Royal Society.

⁴⁵ *Ann. Phys.* (2) 105 (1858), str. 239-258.

kladné rovnice, ktoré sú po ňom pomenované, tvoria dodnes základ klasickej elektrodynamiky, podobne ako Newtonove pohybové rovnice sú východiskom pre klasickú mechaniku. Z Maxwellových rovníc vyplýva existencia elektromagnetického vlnenia a charakteristika viditeľného svetla ako elektromagnetického vlnenia s vlnovými dĺžkami z istej oblasti.

Ak je Faraday iniciátorom silnoprúdovej elektrotechniky, výroby elektrickej energie a jej využitia v priemysle a doprave, Maxwell je duchovným otcom rádia, televízie, radaru, diaľkového ovládania umelých družíc atď.

Podobne ako Faraday mal Maxwell obrovskú zásluhu aj o molekulovú teóriu. Podnietila ho Clausiova druhá práca (z roku 1858), ktorá vyšla v anglickom preklade vo februári 1859 vo Philosophical Magazine. Maxwell sa neuspokojil s Clausiovými závermi, ale hneď vypočítal, ako sú rozdelené podľa rýchlosti molekuly ideálneho plynu, uzavreté pri danej teplote v nejakej nádobe. 30. mája 1859 písal sirovi Georgeovi Gabrielovi Stokesovi (1819–1903) o Clausiovej práci a o svojich výpočtoch a napokon dodal: „Neviem, nakoľko budú súhlasíť moje špekulácie s faktami. Ak by sa ukázalo, že sú v rozpore s experimentmi, aspoň by sme vedeli, že Clausiova teória je nesprávna (t. j. nezodpovedá skutočnosti). V každom prípade urobil som si do istej miery cvičenie v mechanike, keď som odvodil zákony systémov častíc, ktoré vzájomne pôsobia iba prostredníctvom zrážok“. Toľko pomerne voľne preložený citát z Maxwellovho listu. V tomto liste ďalej upozornil na dva výsledky, ku ktorým dospel. Prvý hovorí o tom, že odpor trenia na teleso pohybujúce sa v zriedenom plyne je rovnaký ako v hustom. Túto nezávislosť koeficientu viskozity od hustoty plynu z experimentov poznal už Robert Boyle, ale fyzici si ju nijako nevedeli vysvetliť. Druhý dôležitý výsledok bolo práve odvodenie rozdelenia molekúl ideálneho plynu podľa rýchlostí.

Stokes odporúčal Maxwellovi článok uverejniť. Napokon sa ukázalo, že Maxwellove výpočty vynikajúco súhlasia s experimentmi. Maxwell potom uverejnil ešte viacero prác ku kinetickej teórii plynov.

J. C. Maxwell bol človek, ktorý videl ďaleko do budúcnosti. Skutočného svetového uznania sa mu dostalo až po smrti. Zomrel na rakovinu žalúdka vo veku 48 rokov 5. novembra 1879 v Cambridgei.

Ludwig Eduard Boltzmann sa narodil 20. februára 1844 vo Viedni. Študoval vo Viedni, kde bol spočiatku asistentom svojho učiteľa, profesora Jožefa Stefana (1835–1893). Stefan upozornil Boltzmannu na Maxwellove práce a spolu s nimi mu dal do rúk učebnicu angličtiny. Tak prevzal Boltzmann od Maxwella štafetu rozvíjania kinetickej teórie plynov⁴⁶.

Boltzmann vypracoval základy štatistickej fyziky a vyslovil princíp, podľa ktorého experimentálne pozorovaný samovoľný prechod úplne izolovaného plynného telesa z nerovnovážneho do rovnovážneho stavu je dôsledkom prírodného zákona, podľa ktorého rozloženie molekúl makroskopického telesa v daných podmienkach prejde z menej pravdepodobného do pravdepodobnejšieho stavu. Boltzmannovu teóriu v tom čase odmietli vplyvní chemici a fyzici akými boli Wilhelm Ostwald, Ernst Mach a ich stúpenci. Boltzmann sa do konca života cítil zahanbovaný, ale bol skalopevne presvedčený, že molekulárno-kinetická teória napokon zvíťazí. Zomrel (spáchal samovraždu) v Duine na jadranskom pobreží 5. septembra 1906.

Na základe Boltzmannovej teórie vypracoval Albert Einstein v roku 1905 teóriu Brownovho pohybu, ktorú v roku 1908 experimentálne overil Jean Perrin (1870–1942), nositeľ Nobelovej ceny za rok 1926. Po Perrinových experimentoch väčšina odporcov molekulovej teórie, medzi nimi aj Wilhelm Ostwald (1853–1932, Nobelova cena za rok 1909), radikálne zmenila svoje stanovisko.

Pjotr Nikolajevič Lebedev sa narodil 8. marca 1866 v Moskve. Študoval v Strasbourgu a od r. 1891 pracoval na Moskovskej univerzite, od r. 1900 ako profesor. V roku 1911 odišiel spolu s inými profesormi z univerzity na znak protestu proti zásahom cárskeho ministra školstva Kassa. Zomrel 14. marca 1912 v Moskve. Jeho experimentálny dôkaz tlaku žiarenia (1899) má pre potvrdenie Maxwellovej teórie rovnaký význam ako Hertzove pokusy z roku 1888. Kým Hertzove pokusy podnietili rozvoj rádiotelegrafie na základe Maxwellovej teórie, Lebedevove merania tvoria experimentálnu základňu termodynamiky žiarenia, ktorá napokon viedla ku kvantovej teórii.

Wilhelm Carl Werner Otto Fritz Franz Wien sa narodil 13. januára 1864 v obci Gaffken pri Fischhausene vo Východnom Prusku. Po skončení gymnázia v Kráľovci (terajšom Kaliningrade) študoval matematiku a fyziku v Göttingene, v Berlíne a v Heidelbergu. V r. 1886 obhájil pod vedením Hermanna von Helmholtza (1821–1894) dizertačnú prácu, v ktorej riešil problémy difrakcie svetla. Helmholtz bol

⁴⁶ Boltzmann, ktorý sa stal veľkým Maxwellovým obdivovateľom, bol tiež jedným z prvých propagátorov teórie elektromagnetického poľa.

prvým riaditeľom Fyzikálno-technického ríšskeho ústavu založeného v r. 1887 za pomoci vynálezcu a priemyselníka Wernera von Siemensa (1816–1892). Tento ústav mal podobne ako Cavendishovo laboratórium v Cambridgei a Ústav pre miery a váhy v Sèvres pri Paríži vypracovať vhodné štandardy fyzikálnych veličín. Z podnetu berlínskeho elektrotechnického priemyslu mal Fyzikálno-technický ríšsky ústav experimentálne skúmať spektrálne rozdelenie energie žiarenia. Išlo predovšetkým o praktickú otázku osvetlenia v období, keď začala konkurovať elektrická žiarovka s plynovými lampami. Helmholtz⁴⁷ povolal za asistenta svojho ústavu Wilhelma Wiena, ktorý bol vynikajúcim teoretikom aj experimentátorom. V r. 1893 odvodil na základe termodynamických úvah posunovací zákon, ktorý vysvetľuje zmenu farby tepelného žiarenia v závislosti od teploty. Pri rôznych teplotách je najintenzívnejšia iná farba elektromagnetického vlnenia. Frekvencia kmitov najintenzívnejšej farby sa zvyšuje priamo úmerne s teplotou. Už v tomto zákone bola vlastne „zakódovaná“ závislosť energie žiarenia od frekvencie, ktorú potom formulovali Planck a ešte výraznejšie Einstein. Z Wienovho posunovacieho zákona sa dal určiť tvar rozdeľovacej funkcie, čo využili Planck v r. 1900 a Einstein v r. 1916.

Wien formuloval aj rozdeľovací zákon (1896), ktorý ovplyvnil Planckov aj Einsteinov teoretický výskum. Wien spolu s O. Lummerom v r. 1895 navrhli realizovať Kirchhoffovu myšlienku, podľa ktorej sa môže absolútne čierne teleso simulovať dutinou s malým otvorom. Touto metódou navrhli testovať Stefanov-Boltzmannov zákon a Wienov posunovací zákon.

V r. 1896 W. Wien odišiel z Berlína za mimoriadneho profesora na Vysokú školu technickú do Aachenu. Potom pôsobil ako profesor v Giessene, Würzburgu a napokon v Mníchove. Za zásluhy o výskum žiarenia absolútne čierneho telesa dostal v r. 1911 Nobelovu cenu. Bolo to zaslúžené, lebo bez jeho zákona by nebolo Planckových ani Einsteinových objavov. Pravda, dnešný študent o jeho práci vie málo. Ak sa Wienove zákony (posunovací a rozdeľovací) spomínajú aj v súčasnosti, tak iba ako dôsledky Planckovho zákona žiarenia. Na prácu, ktorú odviedol Wilhelm Wien, sa plne vzťahujú Gaussove slová, podľa ktorých si treba vážiť aj tých, čo stavali lešenia. Lešenia sa dávno strhli, ale budovy ešte stoja... To sa týka aj Wienových objavov v súvislosti s ohybom katódových a kanálových lúčov v elektrických a magnetických poliach. W. Wien zomrel v Mníchove 30. augusta 1928.

Louis Carl Heinrich Friedrich Paschen sa narodil 22. januára 1865 v Schwerine. Študoval matematiku, prírodné vedy a fyziku na univerzitách v Berlíne a v Strasbourgu, kde v r. 1888 získal doktorát. Pôsobil v Münsteri, Hannoveri a od r. 1901 ako riadny profesor v Tübingene, ktorý sa stal Mekkom spektroskopie. Ako sme už spomenuli, v rokoch 1924–1933 bol prezidentom Fyzikálno-technického ríšskeho ústavu v Berlíne. Zomrel 25. februára 1947 v Postupimi.

Paschen dosiahol významné úspechy v spektroskopii (Paschenova séria), ale ešte predtým (od r. 1892) sa úspešne zaoberal meraním intenzity jednotlivých farieb, ktoré vyžaruje absolútne čierne teleso pri rôznych teplotách. Jeho empirický vzorec spektrálneho rozdelenia energie čierneho žiarenia z r. 1896 bol v súlade s Wienovým rozdeľovacím zákonom.

Otto Richard Lummer sa narodil 17. júla 1860 v Gere. Štúdiá dokončil v Berlíne, kde sa stal v r. 1884 Helmholtzovým asistentom. V roku 1887 prešiel spolu s Helmholtzom do Fyzikálno-technického ríšskeho ústavu. Tu spolupracoval s Wilhelmom Wienom a po odchode Wiena z Berlína si hľadal nových spolupracovníkov. Stali sa nimi najmä jeho ústavný kolega Ferdinand Kurlbaum a Ernst Pringsheim z berlínskej univerzity. Spolu s Kurlbaumom vyhotovili elektricky vyhrievaný dutý počiernený platinový valec vložený do väčšieho azbestového valca. Týmto prístrojom uskutočnili sériu veľmi presných meraní intenzity žiarenia rôznych vlnových dĺžok.

Otto Lummer prešiel v r. 1901 na berlínsku univerzitu a od r. 1904 bol riadnym profesorom univerzity vo Vratislavi. Zomrel vo Vratislavi 5. júla 1925.

Ferdinand Kurlbaum sa narodil 4. októbra 1857 v Burgu pri Magdeburgu. Študoval v Heidelbergu a v Berlíne, kde obhájil v r. 1887 doktorskú dizertáciu. Po krátkom pobyte na Vysokej škole technickej v Hannoveri prešiel v r. 1891 do Fyzikálno-technického ríšskeho ústavu, kde pracoval v optickom laboratóriu. V roku 1901 viedol sám laboratórium v tomto ústave a od r. 1904 bol profesorom Vysokej školy technickej v Berlíne. Do dôchodku odišiel v r. 1925 a 29. júla 1927 v Berlíne zomrel.

⁴⁷ Podobne ako miesto riaditeľa Cavendishovho laboratória v Cambridgei aj na vedúce funkcie Fyzikálno-technického ríšskeho ústavu povolávali popredných fyzikov. Po Helmholtzovej smrti prevzal v r. 1895 funkciu riaditeľa Friedrich Wilhelm Georg Kohlrausch (1840–1910), v rokoch 1905–1922 Emil Gabriel Warburg (1846–1931) a v r. 1924–1933 Louis Carl Heinrich Friedrich Paschen. Po nástupe nacistov k moci prevzal túto funkciu Johannes Stark, ktorý skončil podobne ako Philipp Lenard neblaho. Po vojne denacifikačný súd odsúdil Starka na 4 roky straty slobody.

Ernst Pringsheim sa narodil vo Vratislavi 11. júla 1859. Študoval vo Vratislavi, Heidelbergu a Berlíne, kde získal v r. 1882 doktorát. V r. 1886 bol súkromným docentom a neskôr aj profesorom na berlínskej univerzite. V Berlíne spolupracoval s Lummerom a Kurlbaumom a spolu so svojim kolegom z Vysoké školy technickej v Berlíne Rubensom. Pringsheim sa podobne ako Rubens orientoval na výskum intenzity žiarenia v infračervenej oblasti. 2. februára 1900 referoval na zasadnutí Nemeckej fyzikálnej spoločnosti o odchyľkach v infračervenej oblasti od Wienovho rozdeľovacieho zákona, ktoré zistili spolu s Lummerom.

Pringsheim odišiel v r. 1905 do Vratislavi, kde prevzal vedenie Katedry teoretickej fyziky a pokračoval v dlhoročnej spolupráci s Lummerom. Zomrel 28. júna 1917 vo Vratislavi.

Heinrich Leopold Rubens sa narodil 30. marca 1865 vo Wiesbadene. Študoval elektrotechniku na Vysoké škole technickej v Darmstadte a Berlíne a potom fyziku na univerzitách v Strasbourgu a Berlíne, kde získal v r. 1889 doktorát. Od r. 1896 bol profesorom fyziky na Vysoké škole technickej v Berlíne. Od r. 1906 bol profesorom berlínskej univerzity. Rubens v r. 1896 vyvinul novú metódu merania intenzity žiarenia v infračervenej oblasti a v r. 1900 spolu s Kurlbaumom získali presné hodnoty intenzity tohto žiarenia. Tieto merania primali Plancka k revízii celej svojej predošlej teoretickej práce a viedli k formulovaniu a teoretickému zdôvodneniu nového rozdeľovacieho zákona, v ktorom sa prvý raz kvantovala energia. Rubens zomrel v Berlíne 17. júla 1922. V spomienkovom prejave na zasadnutí Berlínskej akadémie pri príležitosti prvého výročia Rubensovej smrti M. Planck zdôraznil, že bez Rubensa by nebol odvodil svoj rozdeľovací zákon. (Bližšie o tom v knihe *Physiker über Physiker II*. Berlin : Akademie – Verlag 1979, s. 233-237.)

Max Karl Ludwig Planck sa narodil 23. apríla 1858 v Kiele, bol profesorom v Kiele a v Berlíne a prezidentom Spoločnosti cisára Wilhelma pre rozvoj vied. Táto inštitúcia je teraz v Mníchove a nesie názov Ústav fyziky a astrofyziky Maxa Plancka. Zomrel v deväťdesiatom roku svojho života 4. októbra 1947 v Göttingene. Nobelovu cenu mu udelili v roku 1918 za objav elementárneho kvanta účinku.

Max Planck sa plné štyri roky (1896–1900) zaoberal teóriou spektrálneho rozdelenia energie žiarenia absolútne čierneho telesa. Bol presvedčený o univerzálnej platnosti prvej a druhej hlavnej termodynamickej vety, a teda aj o tom, že druhú hlavnú termodynamickú vetu možno aplikovať aj na elektromagnetické žiarenie, ak vhodne definujeme jeho teplotu, tlak a iné termodynamické veličiny. Termodynamické úvahy mu umožnili zdôvodniť aj Wienov vzorec, ktorý dobre opisoval rozdelenie energie žiarenia podľa frekvencie pre krátke vlnové dĺžky. Keď mu však v roku 1900 experimentátori oznámili, že pre dlhé vlnové dĺžky jeho vzorec nevyhovuje, hľadal rôzne úpravy, ktorými by svoj vzťah pozmenil a napokon našiel správny vzťah, ktorý vystihoval energetické rozdelenie žiarenia tak v oblasti dlhých, ako aj krátkych vlnových dĺžok. Ale len teraz nasledovali pre Plancka najpernejšie dni a týždne života, keď sa snažil svoj vzťah teoreticky odôvodniť. Planck vo svojej autobiografii spomína, že nebol zástancom Boltzmannovej štatistiky, aplikovanej na molekuly ideálneho plynu. Ale napokon sa presvedčil, že svoj vzorec nemôže odôvodniť ináč, ako pomocou tejto štatistiky. Zatiaľ, čo Boltzmann aplikoval štatistické úvahy na diskkrétne molekuly, ktorých je v danom objeme plynu konečný počet, Planck si musel konečný počet takýchto diskrétnych „dávok“ energie vymyslieť, a to tak, aby súčet konečného počtu týchto dávok, t. j. kvánt energie, sa rovnal celkovej energii žiarenia danej uhlovej frekvencie ω .

Matematický trik so sčítaním konečných energetických dávok použil už v roku 1872 v inej súvislosti Ludwig Boltzmann. Lenže v Boltzmannových výpočtoch energia mohla byť ľubovoľná, aj nekonečne malá, takže napokon prešiel v limite k spojitej zmenenej hodnote. Prečo nemohol takisto postupovať aj Max Planck? Jednoducho preto, že dva parametre, ktoré sa vyskytovali v jeho vzorci, súviseli s hodnotami konštánt, ktoré boli experimentálne presne určené. Bola to konštanta úmernosti v Stefanovom-Boltzmannovom zákone, podľa ktorého celková energia rovnovážneho dutinového žiarenia je úmerná – s presne zistenou konštantou úmernosti – štvrtej mocniny absolútnej teploty stien dutiny. Druhá konštanta vyplýva z Wienovho posunovacieho zákona, podľa ktorého maximum rozdelenia energie žiarenia podľa frekvencií sa posúva po presne určenej priamke. Keďže tieto dve univerzálne konštanty sú jednoznačne zviazané s konštantami v Planckovom vzorci, nemohol ich už meniť a ľahko ich aj výpočtom určil. Tak dostal Max Planck hodnoty dvoch univerzálnych konštánt h , k , ktoré sa vyskytujú v jeho vzorci. Prvá sa nazýva Planckova konštanta a vystupuje v známom výraze pre kvantum energie

$$E = \hbar \omega$$

Druhá sa nazýva Boltzmannova konštanta a jej hodnota je $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$. Keďže táto konštanta predstavuje podiel známej univerzálnej plynovej konštanty (zo stavovej rovnice pre mól ideálneho plynu) $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ a Avogadrovo čísla, určil vlastne Planck aj Avogadrovo číslo, a to zo vzťahu, ktorý zdanlivo nemá nič spoločné s počtom molekúl v móle ideálneho plynu.

Čo sa stane, keď v Planckovom vzorci prejdeme predsa len k limite $E \rightarrow 0$? Keďže $E = \hbar \omega$, je to možné len tak, že Planckovu konštantu v rozpore s výsledkami spomínaných experimentov v limite zmenšíme na ľubovoľne malú hodnotu, teda $\hbar \rightarrow 0$. Ak urobíme takúto limitu v Planckovom vzorci, dostaneme vzťah, ktorý na základe klasických úvah odvodil lord Rayleigh, nositeľ Nobelovej ceny za rok 1904, pôvodne John William Strutt (12. 11. 1842–30. 6. 1919) a James Hopwood Jeans (11. 9. 1877–16. 9. 1946). Podľa tohto vzorca by však mala byť celková energia dutinového žiarenia pri ľubovoľnej teplote nekonečne veľká, čo je v rozpore s každou skúsenosťou. Rayleighov-Jeansov vzorec je v súlade s experimentmi iba v oblasti veľkých vlnových dĺžok. Preto sa v súvislosti s ním hovorilo o ultrafialovej katastrofe.

Planck bol presvedčený o správnosti svojho vzorca, ale dlho sa nemohol zmieriť s myšlienkou, že energia žiarenia je skutočne kvantovaná. Ešte v roku 1913 o Einsteinovi napísal, v inak veľmi kladnom odporúčaní za riaditeľa Ústavu cisára Wilhelma pre fyziku, že v otázke svetelných kvánt „prestrelil“.

Albert Einstein sa narodil 14. marca 1879 v Ulme. V rokoch 1889–1894 študoval na gymnáziu v Mníchove. Školu nedokončil, v roku 1895 navštevoval kantonálnu školu v Aarau (Švajčiarsko), v rokoch 1896–1900 študoval na Konfederálnej vysokej škole technickej v Zürichu, získal aprobáciu stredoškolského učiteľa matematiky a fyziky. V roku 1902 ho prijali za experta tretej triedy na Konfederálnom úrade pre patenty v Berne. V roku 1909 sa stal mimoriadnym profesorom na univerzite v Zürichu, od 15. apríla 1911 bol riadnym profesorom na nemeckej Karlovej univerzite v Prahe. 1. októbra 1912 pôsobil opäť v Zürichu, teraz už ako profesor na Konfederálnej vysokej škole technickej. V roku 1914 odišiel do Berlína, kde bol riaditeľom Ústavu cisára Wilhelma. V roku 1933 uverejnil vyhlásenie o svojom vystúpení z Pruskej akadémie vied. V tom istom roku začal pracovať v Institute for Advanced Study v Princetone, štát New Jersey, v USA. 18. apríla 1955 zomrel v princetonskej nemocnici.

Albert Einstein svojou špeciálnou a všeobecnou teóriou relativity pozmenil po stáročia prijímané názory o priestore, čase a všeobecnej príťažlivosti telies. Vošiel do dejín ako fyzik, mysliteľ aj filozof a verejný činiteľ – humanista a pacifista. Na tomto mieste spomenieme iba Einsteinovu účasť v rozvoji moderného atomizmu.

Einsteinovým zázračným rokom bol rok 1905, keď v jedinom (sedemnástom) zväzku časopisu *Annalen der Physik* uverejnil ešte ako neznámy úradník (postúpil síce už na experta druhej triedy) Úradu pre patenty a vynálezy v Berne tri články, ktorými prevratne zasiahol do fyziky. Dva z nich sa týkajú našej témy, a to stať o fotoelektrickom efekte a o Brownovom pohybe. Hoci sa spomínané práce uvádzajú pod inými heslami, názvy článkov aj ich obsah svedčí o tom, že Einsteinovi nešlo ani tak o uvedené javy, ako o nový pohľad na štruktúru svetla a látky. Prvý článok mal nadpis: O jednom heuristickom aspekte⁴⁸, týkajúcom sa vzniku a premeny svetla.

Einstein tu nadviazal skôr na Wienove ako na Planckove práce o spektrálnom rozdelení hustoty energie žiarenia absolútne čierneho telesa a vyrukoval s takouto myšlienkou: Áno, Maxwellova teória, podľa ktorej svetlo je elektromagnetickým vlnením, je vhodná na vysvetlenie šírenia sa svetla v priestore. Ak však skúmame vzájomné pôsobenie svetla a látky, nemôžeme ani len čiastočne (ako to urobil Planck) použiť Maxwellovu teóriu elektromagnetického poľa. Einsteinov „heuristický aspekt“, uvedený hneď v úvode článku spočíva v tom, že na rozdiel od postulátov klasickej elektrodynamiky svetelná energia „nie je rozložená v priestore spojite, ale pozostáva z konečného počtu v priestore bodovo lokalizovaných energetických kvánt, ktoré sa pohybujú bez toho, aby sa delili, a ktoré môžu byť pohltené a vyžiarené len ako celky“. Šikovné porovnanie termodynamických veličín ideálneho plynu, podliehajúceho Maxwellovmu-Boltzmannovmu rozdeleniu a fotónov, podliehajúcich Wienovmu rozdeleniu (ktoré je v súlade s experimentmi len pre oblasť krátkych vlnových dĺžok), priviedlo Einsteina k vzťahu pre fotoelektrický efekt, uvedenému na s. 25.

O rok neskôršie, na základe hypotézy svetelných kvánt, odvodil Einstein Planckov zákon žiarenia, platný pre celé spektrum. Pritom ukázal, že vlastne už Planck použil túto hypotézu bez toho, aby si to

⁴⁸ Pod pojmom „heuristický aspekt“ rozumieme nový, objavný pohľad na vznik svetla.

uvedomil. (Ako sme už uviedli, Planck nielenže si neuvedomil existenciu svetelných kvánt, ale nijako sa s ňou aspoň desať rokov nemohol zmieriť.)

Einstein dosiahol v rozvíjaní kvantovej teórie ďalší významný úspech v roku 1907, keď naznačil cestu, ako pomocou Planckovho vzťahu $E = h\omega$ vysvetliť odchýlky od klasického výrazu pre špeci-fickú tepelnú kapacitu tuhých látok nameranú pri nízkych teplotách. Na Einsteinove výpočty nadviazal P. J. W. Debye.

Aj pokiaľ ide o Brownov pohyb, spomenieme tu revolučný Einsteinov prístup k problému. Veľa fyzikov sa už pred Einsteinom pokúšalo určiť rýchlosť „cikcakovitého“ pohybu drobných zrníčok peľu alebo iných látok, ktoré sú suspendované v kvapalinách. Einstein ukázal, že táto úloha sa nedá riešiť. Zmysel má iba otázka, ako bude závisieť stredná výchylka častice z danej polohy od času. A na túto otázku dal Einstein odpoveď pomerne jednoduchým výpočtom. Experimentálne potvrdiť Einsteinov vzťah nie je principiálne také ťažké. Stačí porovnať dve mikrofotografie suspendovaných častíc, ktoré sú urobené v danom časovom rozpätí a odmerať vzdialenosť medzi pôvodnou a novou polohou tej-ktorej častice bez toho, aby sme sa zaujímali o cestu, po ktorej sa dostala na nové miesto. Problém je pravda v tom, že časový interval medzi dvoma expozíciami musí byť veľmi malý, aby sme mohli častice identifikovať.

Pri výskume Brownovho pohybu opäť šlo Einsteinovi o viac ako o tento pozoruhodný efekt. Sám o tom v úvode článku⁴⁹ píše: „V tejto práci ukážeme, že podľa molekulárno-kinetickej teórie tepla musia telesá mikroskopických rozmerov, suspendované v kvapalinách v dôsledku molekulárno-tepelného pohybu, uskutočňovať pohyby takých rozmerov, ktoré možno pozorovať pod mikroskopom. Je možné, že uvažovaný pohyb je totožný s tzv. Brownovým pohybom, ... Ak sa bude uvažovaný pohyb skutočne pozorovať, nemožno považovať klasickú termodynamiku za úplne platnú pre mikroskopicky rozlíšiteľné oblasti⁵⁰ a vtedy možno presne určiť skutočné rozmery atómov. Ak sa nepotvrdí predpoklad tohto pohybu, bude to pádny argument proti molekulárnokinetickej predstave o teple“. 26-ročný Einstein sa teda podujal rozsúdiť spory medzi váženými profesormi, akými boli Boltzmann na jednej strane a Ostwald, Helm a iní na druhej strane. Diskusie medzi oboma stranami boli také vášnivé, že podľa Arnolda Sommerfelda pripomínali zápasy toreadora s býkom. Čitateľ z predošlého textu už vie, že tento spor Einstein skutočne rozsúdil v prospech Boltzmannu.

Albert Einstein v období „starej“ kvantovej teórie, t. j. do roku 1925 napísal ešte viacero článkov, ktoré podstatne podnietili ďalší vývin tejto novej fyzikálnej disciplíny. Nobelovu cenu mu udelili v roku 1922 za rok 1921 za zásluhy o rozvoj teoretickej fyziky, najmä za teóriu fotoelektrického efektu.

Joseph John Thomson sa narodil 18. decembra 1856 v Cheetham Hill pri Manchestri. Študoval v Manchestri a v Cambridgei pod vedením Maxwella a lorda Rayleigha. V rokoch 1884–1919 bol profesorom experimentálnej fyziky a riaditeľom Cavendishovho laboratória v Cambridgei, v rokoch 1916–1920 bol prezidentom Royal Society. Zomrel 30. augusta 1940 v Cambridgei. Nobelovu cenu mu udelili v roku 1906.

Thomson vošiel do dejín fyziky predovšetkým experimentálnym dôkazom existencie elektrónov v roku 1897. Bolo to v čase, keď sa fyzici začali zaoberať elektrickými výbojmi v Geisslerových⁵¹ trubiciach, t. j. v sklenených trubiciach, z ktorých vyčerpali vzduch.

Ukázalo sa, že z katódy vyletujú častice a že sklo svetielkuje (takéto svetielkovanie sa nazýva fluorescencia). William Crookes (17. 6. 1832–4. 4. 1919) považoval tieto častice, nazvané katódové lúče, za molekuly látky, lebo dokázal, že roztáčajú vrtuľku, ktorú im postavil do cesty, vychyľujú sa v magnetickom poli, ale neprejavujú vlnové vlastnosti elektromagnetického žiarenia, napríklad neinterferujú. Ako by sa boli skomplikovali jeho úvahy, keby bol býval vedel, že v roku 1927 experimentátori interferenciu katódových lúčov objavili! Ale o tom si niečo povieme až v 4. kapitole.

⁴⁹ Pozri napr. Einstein, A.: *Sobranie naučných trudov III*. Moskva, Nauka 1966, s. 108-117. Nemecký originál vyšiel v *Annalen der Physik* 17 (1905) s. 549-560 pod titulom O pohybe častíc, suspendovaných v nepohybujúcich sa kvapalinách, postulovanom molekulárno-kinetickej teóriou tepla.

⁵⁰ Dnes vieme, že klasickú termodynamiku možno použiť len na makroskopické telesá a makroskopicky pozorovateľné a merateľné javy.

⁵¹ Henrich Geissler (26. 5. 1815–24. 1. 1879) v roku 1855 vynášiel ortuťovú výevu a konštruoval trubice, ktoré sú pomenované po ňom. Prví skúmali elektrické výboje v Geisslerových trubiciach Julius Plücker (1801–1868) a jeho žiak Johann Wilhelm Hittorf (1824–1914). Názov katódové lúče pochádza od Plückera.

V roku 1897 Thomson v Cavendishovom laboratóriu opakovane Röntgenov⁵² pokus, pričom zistil, že plyny ožiarené X-lúčmi sa stávajú vodivými. To vzbudilo jeho záujem aj o katódové lúče a začal ich podrobnejšie študovať. Na tomto mieste treba povedať, že niektorí významní fyzici, predovšetkým Heinrich Hertz, boli presvedčení, že katódové lúče sú vlnením podobne ako viditeľné svetlo. Thomson v r. 1897 ako prvý dokázal, že katódové lúče sa vychýľujú nielen v magnetickom, ale aj v elektrostatickom poli. Tým presvedčil fyzikov, že ide o prúd nabitých častíc. Už v tom istom roku Thomson odmeral pomer e/m pre tieto lúče, pričom e je náboj a m je hmotnosť častíc katódových lúčov. Do trubice umiestnil platne kondenzátora, pričom platňa D_1 bola nabitá záporne a platňa D_2 kladne. Častice sa vychýľovali smerom od D_1 k D_2 , pretože ich náboj je záporný. Pri dopade katódových lúčov na stenu trubice vzniká svietenie a veľkosť výchylky možno určiť z posunutia svietiaceho bodu z miesta P (pri nenabitých platniach) na miesto P' (pri nabitých platniach). Na to, aby z tejto výchylky mohol určiť pomer e/m , potreboval Thomson poznať aj rýchlosť katódových lúčov. Meral ju veľmi vtipnou kompenzačnou metódou. V kondenzátore (pozri obr. 2.16) má elektrické pole záporný smer osi y , t. j. od kladnej k zápornej elektróde. Ak zároveň zapneme magnetické pole v smere zápornej osi z (šípka poľa \mathbf{B} smeruje z roviny obrázka smerom k nám), bude mať výraz $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ kladný smer osi y . Sila pôsobiaca na elektrón je

$$\mathbf{F} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

a pri vhodnom \mathbf{B} sa elektrická a magnetická sila pôsobiaca na elektrón práve vyrovnajú a elektrón dopadne do bodu P tak, ako keby naň nijaké sily nepôsobili. Vtedy musí platiť

$$|\mathbf{E}| = |\mathbf{v}| \cdot |\mathbf{B}|$$

a pri známom $|\mathbf{E}|$, $|\mathbf{B}|$ možno určiť rýchlosť častice bez ohľadu na to, aký je jej náboj a hmotnosť. Týmto poznal Thomson pôvodnú rýchlosť elektrónu v smere osi x a (po vypnutí magnetického poľa) zo vzťahu

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = e\mathbf{E}$$

dostal zrýchlenie v smere osi y : $a_y = \frac{e}{m} E_y$. Odtiaľ určil výchylku v závislosti od e/m a po jej odmeraní určil tento pomer.

Thomson vzal za e náboj elektrónu tak, ako ho definoval Stoney, t. j. náboj ionizovaného atómu vodíka (číselná hodnota určená z Faradayovho náboja a Avogadrovej konštanty), a z experimentálne nájdeného pomeru e/m zistil, že hmotnosť častice katódových lúčov t. j. elektrónu je viac ako 1 800-krát menšia ako hmotnosť atómu vodíka.

Prečo nenechal Thomson v menovateli výrazu e/m hmotnosť vodíkového atómu? V tom prípade by mu náboj častice katódových lúčov vyrástol oproti Stoneyho hodnote vyše 1 800-krát. Katódové lúče by tak boli silne nabitými atómami.

Lenard však ukázal, že katódové lúče vypustené do prázdnej nádoby síce spôsobujú svietenie na stenách, ale ani po dlhšom čase sa nedala v nádobe identifikovať plynná látka. Jediné, čo sa dalo zistiť, bol silný záporný elektrický náboj. Thomson sa teda postaral o ďalší prevrat v dejinách atomistiky. Dokázal, že atóm nie je nedeliteľný a že existujú častice s podstatne menšou hmotnosťou.

V nasledujúcom roku 1898 potom Thomson spolu s Townsendom použili ióny plynu, ktorého celkový náboj poznali ako kondenzačné centrá pre vodné kvapky, ktoré voľne padali v tiažovom poli. Zo Stokesovho zákona určili z rýchlosti klesania kvapky jej veľkosť a teda aj hmotnosť. Keď odmerali napokon celkové množstvo vytvorenej vody, odhadli z veľkosti kvapiek ich počet. Napokon predelili celkový náboj počtom kvapiek. Hoci nešlo o presné merania, dostali pozoruhodné výsledky. Wilson potom túto metódu zdokonalil tým, že gravitačné pole zosilnil elektrostatickým poľom. Thomsonove a Wilsonove merania potom zdokonalil v Chicagu Millikan spôsobom, ako to uvádzame v článku 2.2.

⁵² Conrad Wilhelm Röntgen (1845–1923) objavil v roku 1895 X-lúče, ktoré vznikajú pri dopade katódových lúčov (t. j. prúdu elektrónov) na kovovú anódu. Bol prvým nositeľom Nobelovej ceny za fyziku (1901). Dnes vieme, že X-lúče, nazývané už röntgenové lúče, sú elektromagnetickými vlnami s krátkymi vlnovými dĺžkami – rádovo 10^{-10} m. Spočiatku si ale fyzici mysleli, že Röntgenovo žiarenie má inú povahu ako obyčajné „priechne“ elektromagnetické žiarenie a že je to podobne ako zvuk, pozdĺžne vlnenie, šíriace sa rýchlosťou svetla.

Thomson rozpracoval potom teóriu pohybu elektrónov v magnetických a elektrických poliach, zaoberal sa spektrom röntgenového žiarenia a v roku 1903 navrhol model atómu, ako o ňom píšeme v článku 2.3. V roku 1911 vypracoval metódu parabol, ktorá mala veľký význam pre objavenie izotopov. V rokoch 1912–1913 objavil izotopy neónu. Je jedným zo zakladateľov klasickej elektrónovej teórie kovov a autorom klasickeho vzťahu pre rozptyl svetla na voľných elektrónoch.

Ernest Rutherford, od r. 1931 lord Rutherford of Nelson narodil sa 30. augusta 1871 v Brightwatere pri Nelsone na Novom Zélande. Študoval v Christchurche na Novom Zélande do roku 1894, potom stážoval tri roky u J. J. Thomsona v Cavendishovom laboratóriu v Cambridgei. V rokoch 1898–1907 bol profesorom v Montreale v Kanade, v rokoch 1907–1919 profesorom a riaditeľom fyzikálneho laboratória v Manchestri. Od r. 1919 bol profesorom v Cambridgei a riaditeľom Cavendishovho laboratória.

V r. 1899 objavil lúče α a β a nový rádioaktívny prvok – radón. Spolu s Frederickom Soddy (1877–1956, nositeľ Nobelovej ceny za chémiu za rok 1921) vypracoval teóriu rádioaktívnych rozpadov. Určil kladný náboj častíc α . Za výskum transmutácie prvkov a chémiu rádioaktívnych látok mu udelili v r. 1908 Nobelovu cenu za chémiu.

V r. 1908 spolu s Geigerom skonštruoval prístroj na registráciu rádioaktívnych častíc a dokázal, že častice α sú dvakrát ionizované atómy hélia. V rokoch 1906–1911 skúmal prenikanie častíc α cez rôzne látky, určil zákon ich rozptylu (pozri čl. 2.3) a napokon objavil atómové jadro, ktorého veľkosť určil na 10^{-15} m. Rutherford potom vypracoval planetárny model atómu (pozri čl. 2.5), sám mu však nepripisoval veľký význam. Považoval ho iba za užitočný model na vysvetlenie určitých pokusov s rádioaktívnymi látkami (podľa Léona Rosenfelda a Erika Rüdingerera v knihe *Niels Bohr, His life and work...*, Amsterdam : North Holland Publishing Company, 1967).

V roku 1914 Rutherford objavil protón, dokázal vlnové vlastnosti lúčov γ (keď predtým Max von Laue 1879–1960 dokázal, že röntgenové žiarenie je elektromagnetickým vlnením) a predpovedal možnosť umelej rádioaktivity. V roku 1919 uskutočnil premenu atómov nerádioaktívneho prvku (dusíka) na atómy iného prvku (kyslíka) bombardovaním časticami α a vytvoril tým základy súčasnej jadrovej fyziky: V roku 1920 predpovedal existenciu neutrónu. V roku 1933 experimentálne overil spolu s austrálskym fyzikom Oliphantom (nar. 1901) pri jadrových reakciách Einsteinov vzťah $E = mc^2$. V roku 1934 objavil trícium.

Ernest Rutherford je zakladateľom školy atómovej a jadrovej fyziky. Bol známy svojím mimoriadnym priateľským a nekonvenčným vzťahom k spolupracovníkom a mladým adeptom vedy. Tým sa odlišoval od trochu škrobeného, nevšímavého a nedotklivého J. J. Thomsona. Vari za všetkých Rutherfordových žiakov to charakterizoval Niels Bohr v liste bratovi Haraldovi: „Rutherford je muž, na ktorého sa môžeš spoľahnúť. Prichádza pravidelne, vypytuje sa, ako pokračuje práca a rozpráva sa o najmenších podrobnostiach,... Rutherford je vynikajúci človek a skutočne sa zaujíma o prácu všetkých ľudí, čo sú okolo neho,...“⁵³ A nebolo ich málo, čo vyšli z Rutherfordovej školy.

Okrem Bohra, Geigera a Marsdena, ktorými sa zaoberáme osobitne, spomenieme ďalších fyzikov, napr. Poliaka Kazimierza Fajansa (1887–1975), Angličana Henryho Moseleya (1887–1915), Maďara Györgya Hevesyho (1886–1966), nositeľa Nobelovej ceny za r. 1943, Angličana Jamesa Chadwicka (1891–1974), nositeľa Nobelovej ceny za rok 1935, vnuka zakladateľa Darwinovej teórie, rovnomenného Charlesa Darwina (1887–1962), Nemca Otta Hahna (1879–1968), nositeľa Nobelovej ceny za rok 1944. Neskôršie v Cavendishovom laboratóriu v Cambridgei pracoval u Rutherforda sovietsky fyzik Pjotr Leonidovič Kapica (1894–1984), nositeľ Nobelovej ceny za rok 1978.

Ernest Rutherford zomrel v Cambridgei 19. októbra 1937.

Hans Wilhelm Geiger sa narodil 30. septembra 1882 v Neustadte. Po skončení štúdií v Erlangene pracoval u Rutherforda v Manchestri. Spolu s ním a potom s Müllerom skonštruoval prístroj na registráciu rádioaktívnych častíc. Spolu s Marsdenom sa zaoberal rozptylom častíc a pri prechode cez tenké kovové fólie. V roku 1925 spolu s Bothem experimentálne dokázal zákon zachovania energie v mikrosvete, čo ovplyvnilo vznik kvantovej mechaniky. Zomrel 24. septembra 1945 v Postupimi.

⁵³ Podľa citovanej state z knihy „Niels Bohr...“

Ernest Marsden sa narodil 19. februára 1889 v Richtone v Anglicku. Do roku 1914 pracoval v Manchestri s Rutherfordom. Potom bol profesorom vo Wellingtone na Novom Zélande. Zomrel 15. decembra 1970.

Niels Henrik David Bohr narodil sa 7. októbra 1885 v Kodani. Jeho otec Christian Bohr bol medzinárodne uznávaným profesorom fyziológie, jeho matka Ellen, rodená Adlerová (pôvodne otcova poslucháčka) bola dcéra bankára. V intelektuálnom prostredí rodiny vyrástli dvaja vynikajúci myslitelia, a to fyzik Niels Bohr a jeho mladší brat Harald, ktorý bol matematikom. V rodičovskom dome si osvojili záľubu v športovaní (obaja boli poprední dánski futbalisti) a hlboko humanistický pohľad na národné aj medzinárodné svetonázorové a spoločenské problémy.

Niels Bohr dokončil štúdium na kodanskej univerzite v roku 1908. Ako študent získal cenu Dánskej akadémie vied za prácu o povrchovom napätí kvapalín⁵⁴.

Niels Bohr sa v tomto období najviac zaujímal o elektrónovú teóriu, ktorú rozvíjali Lorentz (1853–1928) v Holandsku, Drude (1863–1906) v Nemecku a J. J. Thomson a James Jeans (1877–1946) v Anglicku. To rozhodlo o odchode 26-ročného Nielsa Bohra na ďalšie štúdiá k J. J. Thomsonovi do Cambridge, kde nastúpil koncom septembra 1911. Tu uverejnil jedinú prácu o elektrónovej teórii kovov a v marci 1912 po krátkej výmene listov odchádza k Rutherfordovi do Manchestru. Od tých čias sa začalo nerozlučné priateľstvo učiteľa a žiaka, onen srdečný vzťah staršieho a mladšieho spolupracovníka, ktorý neskoršie Bohr – obdarený aj prislúšnými vlohami – preniesol na svojich mladších spolupracovníkov.

Vráťme sa však do roku 1913. V súvislosti so svojím modelom atómu vodíka, ktorý vtedy Bohr vytvoril, hovorieval neskoršie o šťastnej okolnosti, že sa narodil v malej krajine, ktorá nemala nijaké nároky vedúceho národa, takže vo svojej mladosti prijal to najlepšie z oboch svetov, s ktorými Dánsko hraničí: „kontinentálnu“ teoretickú tradíciu a anglický empirizmus. Vari práve pre Angličanov nezvyklý špekulatívny prístup k problémom dopomohol Bohrovi k syntéze záverov, ktoré vyplývali z Rutherfordových experimentov a Planckovej-Einsteinovej kvantovej teórie.

V čase, keď Bohr publikoval svoje prvé články o modeli atómu (pozri ďalej časť *Pôvodné odvodenie* v tejto kapitole a čl. 3.3), jeho prácu si nevšimli ani anglickí experimentátori, ani kontinentálni teoretici⁵⁵. Až neskoršie Albert Einstein a Arnold Sommerfeld (1868–1951) postrehli prevratný význam Bohrovho objavu. V rokoch 1915 až 1925 rozvíjala sa potom atómová fyzika na základe Bohrovho-Sommerfeldovho poloklasického modelu.

Bohr v roku 1913 prednášal na kodanskej a v rokoch 1914–1916 na manchesterskej univerzite. Od r. 1916 bol profesorom teoretickej fyziky v Kodani, od r. 1917 členom Dánskej akadémie vied. V roku 1921 založil a viedol Ústav teoretickej fyziky v Kodani a v roku 1922 mu udelili súčasne s Albertom Einsteinom (Einsteinovi so spätnou platnosťou za rok 1921) Nobelovu cenu za fyziku. V tom istom roku Bohr vypracoval prvé teoretické zdôvodnenie periodického systému prvkov, pričom nadviazal na svoje úvahy z roku 1912, podľa ktorých o umiestnení prvku v Mendelejevovej periodickej tabuľke nerozhoduje jeho atómová hmotnosť, ale náboj (protónové číslo).

Začiatkom dvadsiatych rokov, keď bol Bohr na vrchole slávy, nastáva nová etapa v jeho vedeckom vývine, ktorá súvisela predovšetkým s kritikou jeho vlastnej teórie. Na základe princípu korešpondencie, ktorý použil už v roku 1913 a formuloval presne v roku 1918, spolu s novou generáciou fyzikov hľadal cestu k novej kvantovej mechanike. V súvislosti so založením Ústavu teoretickej fyziky v Kodani vznikla kodanská škola, v ktorej sa rodila a zrodila nová kvantová mechanika, jej maticový matematický formalizmus a fyzikálna interpretácia.

Prvým Bohrovým mladým spolupracovníkom sa stal v roku 1916 sebavedomý absolvent univerzity v Leydene Hendrik Anthony Kramers (1894–1952). Bohr a Kramers a potom aj iní fyzici skúmali vzájomné pôsobenie svetla a atómov, najmä disperziu svetla, ktoré prechádza cez látku. Teórie, ktoré vypracovali, čoskoro zastarali, ale zohrali mimoriadne významnú úlohu pri vzniku kvantovej mechaniky v roku 1925.

⁵⁴ K tejto práci sa vrátil v roku 1936, keď vypracoval kvapkový model atómového jadra, takže aj v tomto prípade sa uplatnila zásada: „Čo sa v mladosti naučíš, po rokoch ako keby si našiel.“

⁵⁵ V tom čase sa v Bruseli konal druhý Solvayov kongres, na ktorom sa zúčastnili poprední fyzici. Tu sa ďalej hovorilo tak o Thomsonovom modeli atómu, ako aj o kvantovej teórii žiarenia a tuhých látok, ako ju rozvíjali Planck a Einstein.

V dvadsiatych rokoch sa v Bohrovom ústave v Kodani stretávali fyzici, ktorí stáli pri zrode kvantovej mechaniky. V diskusiách s Bohrom sa rodili nové nápady a nový pohľad na mikrosvet. Bol to pohľad, ktorý sa snažíme aj v tejto knihe sprístupniť čitateľovi.

Čím prirodzenejšie, nekonvenčne a partnersky sa správal Bohr k svojim mladým kolegom, tým viac si ho vážili. Heisenbergovo prvé stretnutie s Bohrom v Göttingene (prvý bol ešte poslucháčom, druhý laureátom Nobelovej ceny) sa skončilo spoločnou vychádzkou do blízkeho okolia mestečka. Jeho prvý kontakt s Bohrom v Kodani v roku 1924 sa začal trojdňovým výletom, na ktorom sa rozprávalo o všetkom možnom, od viny cisárskeho Nemecka na rozpútání prvej svetovej vojny, po aktuálne problémy kvantovej teórie. Bohr si vážil ľudí, ktorí mu oponovali, sám v diskusiách vystupoval jemne, nikdy sa nevystatoval a hovoril tak, aby nikoho neurazil.

Vďaka svojej nesmiernej fyzikálnej invencii a svojim osobným vlastnostiam vytvoril školu, ktorá založila novú éru v dejinách teoretickej fyziky. Príslušníci a prívrženci tejto školy sú pioniermi modernej fyziky. Spomeňme len Wernera Heisenberga (1901–1976), nositeľa Nobelovej ceny za rok 1932, Wolfganga Pauliho (1900–1958), nositeľa Nobelovej ceny za rok 1945, Paula Adriana Mauricea Diraca (1902–1984), nositeľa Nobelovej ceny za rok 1933, Felixu Blocha (nar. 1905), nositeľa Nobelovej ceny za rok 1952, Leva Davidoviča Landaua (1908–1968), nositeľa Nobelovej ceny za rok 1962, a napokon aj jeho syna Aage Bohra (nar. 1922), nositeľa Nobelovej ceny za rok 1975.

Hans Bohr v citovanej knihe „Niels Bohr...“ píše o tom, že spomienky detí Nielsa Bohra sa spájajú s mnohými „ujami“ rôznych národností, ktorí k nim chodili do domu alebo do chalupy v Tisvilde, kde sa často spolu hrali a športovali. Deti Nielsa Bohra dobre poznali uja Kramersa, uja Kleina, uja Hevesyho, uja Nishina a uja Heisenberga. Prvý bol Holanďan, druhý Švéd, tretí Maďar, štvrtý Japonec a posledný Nemeč. Čitateľ, ktorý sa raz bude zaoberať štúdiom fyziky, stretne sa so všetkými uvedenými menami.

Niels Bohr mal aj húževnatých oponentov, medzi nimi aj významných fyzikov, ako boli Albert Einstein a Erwin Schrödinger, ktorí neprijali kodanskú interpretáciu kvantovej mechaniky. Najmä desaťročia trvajúce diskusie s Einsteinom umožnili ujasniť a spresniť mnohé formulácie v kodanskej interpretácii kvantovej mechaniky.

V tridsiatych rokoch sa pozornosť fyzikov obrátila na atómové jadro. Bohr, ako sme už spomenuli, vypracoval kvapkový model jadra. Potom v roku 1939 spolu s Johnom Archibaldom Wheelerom (nar. 1911) vypracoval pojednanie o štiepení jadra.

Začiatok druhej svetovej vojny znamenal koniec idyllickej spolupráce v oblasti fyziky rôznych národností v Kodani. Bohr sám sa v roku 1943 dobrodružným spôsobom dostáva cez Švédsko do USA, kde sa zúčastnil na angloamerickom atómovom projekte. V čase, keď Američania zhodili prvé dve bomby na Hirošimu a Nagasaki, Bohr už bol späť v Kodani a v ťažkých podmienkach nadviazal na svoje predvojnové úsilie dorozumieť sa s fyzikmi všetkých národností. Od r. 1955 bol predsedom Dánskej komisie pre atómovú energiu. Zomrel vo svojom dome v Kodani 18. novembra 1962, štvrt' roka po zlatej svadbe.

Gustav Ludwig Hertz sa narodil 22. júla 1887 v Hamburgu. Bol synovcom Heinricha Rudolfa Hertza (1857–1894), ktorý ako profesor Vysokej školy technickej v Karlsruhe, v tamojšej veľkej posluchárni, v roku 1888 prvý raz experimentálne dokázal existenciu elektromagnetických vln, ktoré predpovedal Maxwell.

Gustav Hertz po skončení vysokoškolských štúdií pracoval v rokoch 1913–1920 na univerzite v Berlíne. Potom striedavo pôsobil na vysokých školách a v laboratóriách významných podnikov, v rokoch 1935–1945 v podniku Siemens. V rokoch 1945–1954 bol v ZSSR, kde mu v r. 1951 udelili Štátnu cenu. V rokoch 1955–1960 bol profesorom v Lipsku. Zomrel vo vysokom veku 30. októbra 1975 v Berlíne.

V roku 1926 mu udelili spolu s Jamesom Franckom Nobelovu cenu za objav zákonitostí pri zrážkach elektrónov s atómami. Ako uvádzame v čl. 2.7, pokusy, v ktorých sledoval spolu s Franckom zrážky elektrónov s atómami ortuti, patrili medzi najvýznamnejšie experimentálne dôkazy diskretných energetických hladín elektrónov v atómoch. Pre zaujímavosť uvádzame, že vo svojej správe O vzbudení rezonančnej čiary ortuti s vlnovou dĺžkou 2 536 Å nárazmi elektrónov Franck a Hertz vôbec nespomínajú Bohrovu teóriu, podľa ktorej v dôsledku zrážky s dopadajúcim elektrónom preskočí valenčný elektrón ortuti do vyššej energetickej hladiny a po návrate do základného stavu vyžiari spektrálnu čiaru uhlovej frekvencie $\omega_{mn} = (E_n - E_m) / \hbar$, kde E_m , je energia základného a E_n vzbudeného stavu. Franck a Hertz predpokladali na základe pôvodnej Planckovej a Einsteinovej hypotézy, že valenčný elektrón kmitá

s uhlovou frekvenciou ω_{nm} a že potrebná energia $E = \hbar\omega = 4,9 \text{ eV}$ je ionizačná energia. Preto príslušnú čiaru nazvali rezonančnou čiarou. Až v r. 1917 prijali správnu interpretáciu, keď viacerí fyzici experimentálne potvrdili Bohrov predpoklad, že ionizácia malého zlomku ortuťových atómov je pri tomto pokuse sekundárnym efektom.

James Franck sa narodil 26. augusta 1882 v Hamburgu. Bol profesorom v Berlíne a Göttingene. Od r. 1935 žil v USA, za druhej svetovej vojny spolupracoval na americkom atómovom projekte, ale v r. 1945 varoval pred použitím atómovej bomby. V r. 1964 sa vrátil do Göttingenu, kde 21. mája toho istého roku zomrel.

J. Franck sa zaoberal meraním dráh, rýchlostí a nábojov iónov, fluorescenciou pár ortuti a spolu s Lisou Meitnerovou (1878–1968) rádioaktívnymi iónmi. Od r. 1919 úzko spolupracoval s N. Bohrom pri určovaní excitačných potenciálov rôznych prvkov. V r. 1926 dostal (spolu s G. Hertzom) Nobelovu cenu (za rok 1925) za objav zákonov zrážok elektrónov s atómami.

Arthur Holly Compton sa narodil 10. septembra 1892 vo Woostere v americkom štáte Ohio. Študoval vo Woostere a v Princetone. Pôsobil na univerzite v Minnesote (Minneapolis) a vo výskume v Pittsburghu. V r. 1919–1920 pracoval v Cavendishovom laboratóriu v Cambridgei v Anglicku. Po návrate do USA bol profesorom Washingtonovej univerzity v Saint Louis a chicagskej univerzity.

V roku 1922 objavil Comptonov efekt a nezávisle od Debya vypracoval teóriu tohto javu. Vypracoval metódu na určenie vlnových dĺžok röntgenových lúčov. V r. 1927 dostal Nobelovu cenu za objav efektu nazvaného po ňom. Zomrel 15. marca 1962 v Berkeley v USA.

Pieter Joseph Wilhelm Debye (Petrus Josephus Wilhelmus Debije) sa narodil 24. marca 1884 v Maastrichte v Holandsku. V rokoch 1901–1905 študoval elektrotechnické inžinierstvo v Aachene, prijal asistentúru u Arnolda Sommerfelda (1868–1951) a v r. 1906 s ním odišiel na univerzitu do Mníchova. Tu sa v r. 1910 habilitoval a v r. 1911 ho vymenovali za mimoriadneho profesora fyziky na univerzite v Zürichu. Toto miesto sa uvoľnilo po Einsteinovom odchode do Prahy. V rokoch 1912–1935 bol profesorom v Utrechte, v Zürichu a v Lipsku. V r. 1935 odišiel opäť na miesto uvoľnené po Einsteinovi za riaditeľa Fyzikálneho ústavu cisára Wilhelma do Berlína. (Einstein sa v r. 1933 už nevrátil do Nemecka a vystúpil z Pruskej akadémie vied). Napokon v roku 1940 aj Debye emigroval z Nemecka do USA, kde sa stal profesorom chémie na Cornellovej univerzite v Ithace (štát New York). V r. 1950 odišiel do dôchodku. Zomrel 2. novembra 1966 v Ithace.

Zaoberal sa kvantovou teóriou tuhých látok, teóriou tepelnej vodivosti kryštálov, štruktúrou atómov a molekúl. Ako sme už uviedli, je zakladateľom modernej teórie tuhých látok. Pokiaľ ide o kvantovú teóriu atómov, spolu s Arnoldom Sommerfeldom vypracoval v r. 1916 teóriu rozštiepenia spektrálnych čiar v magnetickom poli a v rámci starej kvantovej teórie zaviedol magnetické kvantové číslo. Spolu s Paulom Scherrerom (1890–1970) zaviedol metódu skúmania kryštalických materiálov pomocou röntgenového žiarenia (Debyeogramy). V r. 1923 vypracoval teóriu Comptonovho efektu. Je zakladateľom výskumu polymérov. V r. 1936 dostal Nobelovu cenu za chémiu.

3 SÚVISLOSTI MEDZI ZÁKLADNÝMI VELIČINAMI ATÓMOVEJ FYZIKY ALEBO ROZMEROVÁ ANALÝZA A KVALITATÍVNE ODHADY

3.1 ÚVOD

O tom, ako vyzerá práca fyzika, kolujú rozličné chýry. Jedna predstava, rozšírená najmä medzi žiakmi s rozvinutými matematickými schopnosťami, je asi takáto. Fyzik – experimentátor sa zaoberá meraniami nejakých veličín alebo závislostí medzi niekoľkými veličinami. Fyzik – teoretik odvodzuje závislosti tak, že vezme všeobecne platný zákon a potom z neho príslušnú závislosť deduktívne (tak ako v matematike) odvodí. Alebo, keď príslušnej všeobecne platnej závislosti ešte niet, teoretik si sadne, rozmýšľa a rozmýšľa až na daný všeobecný zákon príde. Znie to všetko romanticky, ale ako to už s romanticky znejúcimi vecami býva, nie je to celkom pravda. Príslušnú zjednodušenosť určitého obrazu vidno už z toho, že tu akosi chýba súvis medzi experimentom a teóriou.

V skutočnosti je situácia oveľa zložitejšia. Predstavme si napríklad, že študujeme prúdenie tekutín. Vieme, že sa skladá z molekúl, medzi ktorými pôsobia isté sily, ktoré závisia od vzdialenosti medzi molekulami. V princípe by sme si mohli predstaviť, že napíšeme pre každú molekulu Newtonovu pohybovú rovnicu, potom všetky rovnice vyriešime a problém je hotový. Ale prakticky, ba ani „v princípe“ sa to nedá urobiť. Molekúl je totiž priveľa, v jednom kilomóle látky ich je $6 \cdot 10^{26}$ a toľko rovníc sa nedá ani napísať, nieto riešiť. Okrem toho, „presné“ riešenie by sme aj tak nedostali, nepoznáme totiž „presné“ sily medzi molekulami. Kým sú molekuly ďaleko od seba, dala by sa v princípe použiť klasická fyzika, ale keď sú blízko pri sebe, prejavuje sa podstatne ich vnútorná štruktúra a tá už nie je daná zákonmi klasickej fyziky.

Vidno tu teda, že na každom stupni poznania fyzika nie je uzavretý deduktívny systém a pri štúdiu určitej oblasti javov nemožno postupovať striktnie deduktívne.

Na začiatku sú zväčša experimenty, v ktorých sa ukážu základné vlastnosti javu, potom sa vlastnosti, ktoré sú podstatné a rozhodujúce oddelia od ostatných a až potom možno postupovať ďalej. Napríklad pre tekutiny, keď už sme raz o nich začali hovoriť; patria k takýmto podstatným vlastnostiam hustota, viskozita, stlačiteľnosť, povrchové napätie atď. V ďalšom štádiu sa nachádzajú z experimentu alebo z teoretických úvah isté vzťahy medzi základnými veličinami. Zväčša sú to najprv jednoduché súvislosti a potom širšie teoretické schémy či základné rovnice. Nájdenie základných premenných a jednoduchých súvislostí je často veľmi zložitý, ako to vidno v nasledujúcom príklade.

Už v roku 1911 sa zistilo, že niektoré kovy majú pri nízkych teplotách, t. j. pri niekoľkých kelvinoch prakticky nulový odpor voči elektrickému prúdu. Jav bol nazvaný supravodivosťou. Neskôr sa našli aj iné zaujímavé, najmä magnetické vlastnosti kovov v supravodivom stave. Postupne sa hľadali súvislosti medzi týmito vlastnosťami a počet zaujímavých vlastností rástol, až bolo možné hľadať skutočnú príčinu celého komplexu javov. Možností na prvý pohľad bolo veľa: mohli to byť zmeny v kryštálovej mriežke, zmeny vo vlastnostiach elektrónov pohybujúcich sa v danom prostredí, vzájomné pôsobenie elektrónov a kryštálovej mriežky atď. Až začiatkom päťdesiatych rokov sa ukázalo, že príčinou je naozaj vzájomné pôsobenie elektrónov a mriežky a až potom vzniklo teoretické pochopenie celého komplexu javov spojených so supravodivosťou.

Vo všetkých štádiách vývoja bola podstatná spolupráca experimentu a teórie a analýza súvislostí jednotlivých veličín a počas celých, takmer päťdesiatich rokov nebolo možné postupovať deduktívne, pretože úplná teória javu, t. j. „základné rovnice“, nejestvovali. Postupný vznik pochopenia supravodivosti patrí k heroickým činom 20. storočia, ale tou istou cestou vývoja prechádza poznanie v takmer všetkých oblastiach fyziky. Vidno teda, že fyzika zďaleka nie je čisto deduktívnym systémom, ako sa niekedy pri jej vyučovaní zdá.

A tie isté postupy a problémy sa prejavujú aj v oveľa „menších“ otázkach; ba aj pri jednotlivých praktických problémoch, kde treba najprv porozumieť základným súvislostiam, nájsť príčiny a až potom možno úlohu riešiť. Uvedme niekoľko príkladov:

– ak určitý materiál pohlcuje svetlo s istými vlnovými dĺžkami a svetlo s inými vlnovými dĺžkami prepúšťa, súvisí to s viacnásobným rozptylom svetla v materiáli, so vzájomným pôsobením medzi žiarením a atómami, alebo s niečím iným?

– štruktúra atómov súvisí s elektrickými silami medzi jadrom a elektrónmi, s gravitačnými silami alebo s niečím iným?

– príjem televízneho signálu v danej dedine je podstatne ovplyvnený: pohlcovaním signálu v atmosfére, odrazom signálu od jednotlivých vrstiev atmosféry, odrazom či pohlcovaním signálu okolitými kopcami, alebo niečím iným?

Na takto formulované otázky treba hľadať najprv kvalitatívne odpovede, treba nájsť súvislosti rozličných javov a veličín, vydeliť tie, ktoré sú podstatné a až potom možno hľadať kvantitatívne, t. j. presné číselné vyjadrenia.

Pri kvalitatívnej argumentácii sa netreba zaujímať o presné číselné hodnoty jednotlivých veličín, spravidla stačí iba približný odhad. Skúmajme napríklad otázku, či pre štruktúru atómu vodíka sú podstatné elektromagnetické alebo gravitačné sily. Pre príťažlivú Coulombovu silu máme

$$F_C = K \frac{e_1 e_2}{r^2}, \quad K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

Ak sem dosadíme $K = 9 \cdot 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{C}^{-2}$, $e_1 = e_2 = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, $r = 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ (typický rozmer atómu), dostaneme $F_C \approx 10^{-7} \text{ N}$. Pre gravitačné sily máme

$$F_C = \kappa \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

kde $\kappa = 6,673 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$, $m_1 = m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, $m_1 = m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ a odhad dá niečo okolo $4 \cdot 10^{-47} \text{ N}$. Vidno, že výpočty nemusíme vôbec robiť presne – boli by stačili aj oveľa hrubšie odhady – aj tak by bolo jasné, že gravitačné sily môžeme celkom zanedbať.

Dajme si teraz ale ťažšiu otázku. Môžu elektrostatické sily vysvetliť charakter spektier? Zdôraznime hneď, že nechceme odpoveď na zložité otázky typu: aká je štruktúra atómu, čo spôsobuje existenciu kvantových stavov a pod., ale chceme vedieť len to, či Coulombove sily sú zhruba primerane veľké, aby to mohli vysvetliť. Uvažovať by sme mohli asi takto: Vieme, že Coulombova sila v atóme vodíka je okolo 10^{-7} N . Vieme tiež, že typický rozmer atómu vodíka je rádovo 10^{-10} m . Ak atóm prechádza zo základného do excitovaného stavu, potom je celkom dobre možné, že jeho rozmer sa bude meniť, pričom zmeny budú tiež rádovo 10^{-10} m . Zmena potenciálnej energie atómu bude rádovo rovná pôsobiacej sile násobenej zmenou rozmeru atómu. Takto dostaneme $10^{-7} \text{ N} \cdot 10^{-10} \text{ m}$, teda 10^{-17} J . V atómovej fyzike často používame jednotku 1 eV (elektrónvolt), $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ a máme $10^{-17} \text{ J} \approx 60 \text{ eV}$. Z predchádzajúcej kapitoly už ale vieme, že rozdiel energie medzi základným a prvým excitovaným stavom je okolo 10 eV: Náš veľmi nepresný odhad dal pre zmenu potenciálnej energie veličinu asi 6–krát väčšiu – ale to nie je prekvapujúce – silu sme odhadli len veľmi zhruba, zmenu vzdialenosti tiež a navyše sme nerozmýšľali o možnej zmene kinetickej energie. Výsledok je teda celkom povzbudzujúci: je nádej, že elektrostatické pôsobenie medzi elektrónom a protónom má podstatnú úlohu pri vzniku kvantových stavov atómov. Keby sme to isté urobili s gravitačnou silou, zistili by sme, že táto môže priviesť len k energetickým rozdielom rádovo 10^{-38} eV , a to je úplne zanedbateľné.

Najschodnejšia metóda na jednoduché približné odhady je rozmerová analýza. Budeme sa jej venovať v nasledujúcich dvoch článkoch.

3.2 ROZMEROVÁ ANALÝZA – METÓDA NA RÝCHLE ZÍSKANIE PŘIBLIŽNÉHO VÝSLEDKU

Každý sa občas dostane do situácie, že musí čosi zrátať, ale zabudol ten pravý vzorec. Sedí napríklad na písomke a má zrátať dostredivé zrýchlenie pri rovnomernom pohybe po kružnici, pričom zo zadania

vie, že teleso sa pohybuje rýchlosťou v a polomer kružnice je r . Hlavou mu bežia kandidáti vzorcov pre zrýchlenie $a = v^2/r$, $a = vr^2$, $a = r^2/v$, $a = v^2/r$ a nevie sa rozhodnúť pre jeden z nich. Problém okamžite rieši rozmerová analýza. Stačí napísať $a = v^\alpha r^\beta$ kde α , β sú zatiaľ neznáme čísla. Vieme ale, že obe strany rovnice musia mať rovnaký rozmer. Ak označíme jednotku dĺžky L a jednotku času T , potom zrýchlenie má rozmer (označujeme hranatou zátvorkou) $[a] = LT^{-2}$, rýchlosť $[v] = LT^{-1}$ a polomer $[r] = L$. Z predchádzajúcej rovnice pre zrýchlenie dostaneme

$$[a] = [v]^\alpha [r]^\beta$$

a po dosadení

$$LT^{-2} = [LT^{-1}]^\alpha L^\beta = L^{\alpha+\beta} T^{-\alpha}$$

Hneď vidno, že $\alpha = 2$, aby T vystupovalo na oboch stranách s rovnakým exponentom. Potom zistíme, že $\alpha + \beta = 1$, aby bol rovnaký exponent aj pri L a hneď $\beta = -1$. Vrátime sa na začiatok a vidíme, že správny vzťah je

$$a = v^2 r^{-1} = \frac{v^2}{r}$$

Rozmerová analýza nám pomohla nájsť správny vzorec! Ale, a to je pre ňu typické, nemôže nám povedať, či na pravej strane nechýba ešte nejaký číselný koeficient, povedzme π , $1/\pi$ alebo $\sqrt{2}$. Našťastie vo vzťahoch, ktoré sa vyučujú na strednej škole, sa nevyskytujú číselné faktory typu $9,24 \cdot 10^{-15}$ či $0,24 \cdot 10^{-16}$, takže vzťahy získané rozmerovou analýzou sú spravidla aj dobrými približnými odhadmi. Nie je to celkom náhoda; ak sú základné premenné, ktoré používame, zvolené tak, že odpovedajú charakteru a rozmerom problému, potom vzťahy medzi nimi sú jednoduché a číselné koeficienty majú „rozumnú veľkosť“, povedzme medzi 0,1 a 10.

Uveďme ešte jeden príklad. Matematické kyvadlo dĺžky l sa kýve v zemskom gravitačnom poli. Chceli by sme vedieť, ako bude vyzeráť vzťah pre dobu kyvu. Najprv treba nájsť základné veličiny problému. Jednou z nich bude dĺžka kyvadla, druhou zemské gravitačné zrýchlenie. Skúsme teda pre dobu kyvu t vzťah

$$t = l^\alpha g^\beta$$

Po dosadení rozmerov

$$t = L^\alpha (LT^{-2})^\beta$$

Po krátkej úvahe $\beta = -1/2$, $\alpha = 1/2$. Takto prideme k výslednému vzťahu

$$t = \sqrt{\frac{l}{g}}$$

Tento vzťah je ale chybný, pretože správny číselný koeficient nie je 1, ale 2π . Správny vzťah je

$$t = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}} \quad (1)$$

Keby sme chceli postupovať korektne, boli by sme všade vypisovali neznámy číselný koeficient, takže rozmerová analýza by bola viedla k vzťahu

$$t = k \sqrt{\frac{l}{g}} \quad (2)$$

pričom bezrozmerný koeficient k ostáva rozmerovou analýzou neurčený.

V súvislosti s rozmerovou analýzou vzniká veľa otázok. Napríklad: načo sú dobré vzorce, v ktorých nepoznáme číselný koeficient? Namiesto všeobecnej odpovede uveďme naivný a vymyslený príklad. Predstavte si, že máte navrhnuť nejaké obrovské kyvadlo tak, aby malo zadanú dobu kmitu a predstavte

si, že poznáte iba vzorec (2) s neurčitým koeficientom. Úloha sa rieši jednoducho: zostrojíme malý a lacný model s dĺžkou l_1 experimentálne odmeriame jeho dobu kyvu a dostaneme

$$t_1 = k \sqrt{\frac{l_1}{g}}$$

Ak týmto vzťahom predelíme (2), dostaneme

$$\frac{t}{t_1} = \sqrt{\frac{l}{l_1}} \quad (3)$$

odtiaľ už koeficient k vypadol. Vzťah (2) hovorí, ako sa mení doba kyvu v závislosti od dĺžky kyvadla a ak si urobíme model, ktorý premeriame, poznáme už presne dobu kyvu aj pre reálnu situáciu. Výsledkom typu (3) sa hovorí vzťahy mechanickej podobnosti. Náš príklad bol príliš jednoduchý aj preto, že správny vzťah pre dobu kyvu poznáme, ale v praxi je veľa situácií, keď vzorec naozaj nie je známy (napríklad nárazové vlny po výbuchu pod vodou či vo vzduchu, alebo vlastnosti komplikovaného turbulentného prúdenia kvapalín) a potom sú zákony podobnosti veľmi užitočné. Druhá otázka je takáto: pre dobu kmitu kyvadla nám všetko vyšlo, lebo sme vopred vedeli, že T bude závisieť len od l a g . Čo by sa stalo, keby sme to nevedeli?

Tu môže nastať niekoľko situácií. Predstavme si najprv, že metóde „podhodíme“ nejaké nadbytočné premenné – naznačíme jej napríklad, že doba kyvu môže závisieť od l , g ako doteraz a navyše aj od hmotnosti telieska m . Potom by sme napísali

$$T = l^\alpha g^\beta m^\gamma$$

Ak rozmer hmotnosti označíme M , dostaneme na oboch stranách rozmery

$$T = L^\alpha (LT^{-2})^\beta M^\gamma$$

Ľahko vidíme, že $\gamma = 0$, lebo na ľavej strane niet ničoho s rozmerom hmotnosti. Pre α , β dostaneme to, čo predtým. Metóda teda sama ukázala, že výsledok nebude závisieť od hmotnosti.

Iná situácia by nastala, keby sme predpokladali, že čas kyvu môže závisieť od l , g a od rýchlosti c . Vtedy rozmerová analýza nevedie k jednoznačnému výsledku (skúste sa o tom presvedčiť), a dostaneme

$$t = \sqrt{\frac{l}{g} \left(\frac{lg}{c^2} \right)^\rho}$$

kde ρ je celkom ľubovoľné. Vtip je v tom, že veličina lg/c^2 je bezrozmerná. Metóda rozmerovej analýzy nevie akú úlohu majú bezrozmerné veličiny v danom probléme. V našom prípade je správnym výsledkom $\rho = 0$ (vtedy vypadne premenná c , ktorá tam nepatrila), ale vo všeobecnosti by sme ρ museli určiť z experimentu.

Napokon si predstavme, že metóde „podstrčíme“ zlé premenné, teda nie tie, od ktorých proces naozaj závisí, v našom prípade l , c (a predstierajme, že o podstatnej úlohe g nevieme). Za c berieme rýchlosť svetla vo vákuu.

Metóda vtedy rýchlo dá

$$t = k \frac{l}{c} \quad (4)$$

kde k je bezrozmerný koeficient. Keby sme tento vzťah porovnali s jediným experimentálnym údajom (povedzme, že by sme pri $l = 10$ m zistili, že $t = 6,2$ s) videli by sme, že číselný koeficient k by bol okolo $18 \cdot 10^8$ a to už vyzerá veľmi podozrivo. Z dvoch experimentálnych údajov by sme sa ihneď presvedčili o tom, že vzťah (4) je chybný, lebo výsledky zo (4) protirečia správne (3).

Vidno teda, že metóda rozmerovej analýzy nám môže povedať, či sme základné premenné vystihli dobre alebo zle, a to buď tým, že číselné koeficienty nadobúdajú „patologické hodnoty“ alebo tým, že výsledné vzťahy protirečia aj skromnému experimentálnemu materiálu.

Treba ale priznať, že niekedy je naozaj ťažko základné premenné vybrať a také situácie si vyžadujú veľa práce ešte pred možnosťou použiť rozmerovú analýzu.

3.3 ROZMEROVÁ ANALÝZA A VLASTNOSTI ATÓMOV

Práve sme hovorili o tom, že rozmerová analýza môže prezradiť, či poznáme základné a rozhodujúce premenné určitého problému. Poďme to hneď vyskúšať pri vlastnostiach atómov.

Za základné premenné vyberieme hmotnosť elektrónu m_e , jeho náboj e a Planckovu konštantu \hbar . Ich hodnoty sú

$$\begin{aligned}\hbar &= 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \\ m_e &= 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \\ e &= 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}\end{aligned}\tag{1}$$

Ak ale predpokladáme, že náboj sa uplatňuje prostredníctvom elektrostatickej interakcie s jadrom atómu, tak náboj bude vstupovať do hry iba v kombinácii

$$Ke^2 \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0} e^2 = 2,3 \cdot 10^{28} \text{ kg}\cdot\text{m}^3\cdot\text{s}^{-2}$$

a za základné veličiny považujeme \hbar , m_e , Ke^2 . Zopakujme si ich rozmery (M – hmotnosť, L – dĺžka, T – čas)

$$\begin{aligned}[\hbar] &= \text{J}\cdot\text{s} = \text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1} = ML^2T^{-1} \\ [m_e] &= \text{kg} = M \\ [Ke^2] &= \text{kg}\cdot\text{m}^3\cdot\text{s}^{-2} = ML^3T^{-2}\end{aligned}\tag{3}$$

a poďme na základe rozmerovej analýzy odhadnúť polomer atómu – pre určitosť si predstavíme atóm vodíka. Jeho polomer označíme a_1 a píšeme

$$a_1 = \hbar^\alpha (Ke^2)^\beta (m_e)^\gamma$$

Po zapísaní rozmerov na oboch stranách

$$L^1 M^0 T^0 = (ML^2 T^{-1})^\alpha (ML^3 T^{-2})^\beta M^\gamma = M^{\alpha+\beta+\gamma} L^{2\alpha+3\beta} T^{-\alpha-2\beta}$$

Porovnaním rozmerov na oboch stranách dostaneme podmienky pre koeficienty

$$\begin{aligned}1 &= 2\alpha + 3\beta \\ 0 &= \alpha + \beta + \gamma \\ 0 &= \alpha + 2\beta\end{aligned}$$

Z prvej a tretej rovnice nájdeme α , β a z druhej potom určíme γ . Výsledok je

$$\alpha = 2, \beta = -1, \gamma = -1$$

a po dosadení do (4) dostaneme

$$a_1 = \frac{\hbar^2}{m_e Ke^2} = 0,53 \cdot 10^{-10}\tag{5}$$

pričom sme neurčený číselný koeficient položili rovný jednej. Výsledok je potešiteľný, lebo je toho istého rádu ako rozmery atómov. Veličina a_1 sa nazýva tiež Bohrovým polomerom atómu vodíka a je typickou dĺžkou v atómovej fyzike.

Poďme teraz nájsť typickú rýchlosť. Položíme zase

$$v_1 = \hbar^\alpha (Ke^2)^\beta (m_e)^\gamma\tag{6}$$

Po dosadení rozmerov

$$M^0 L^1 T^{-1} = (ML^2 T^{-1})^\alpha (ML^3 T^{-2})^\beta M^\gamma$$

Príslušné podmienky na α , β , γ sú

$$\begin{aligned}0 &= \alpha + \beta + \gamma \\ 1 &= 2\alpha + 3\beta \\ 1 &= \alpha + 2\beta\end{aligned}$$

Z druhej a tretej rovnice nájdeme α , β a potom z prvej γ . Výsledok je $\alpha = -1$, $\beta = 1$, $\gamma = 0$ a pre typickú rýchlosť dostávame zo vzťahu (6)

$$v_1 = \frac{Ke^2}{\hbar} = 2,2 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad (7)$$

Táto rýchlosť je zhruba rovná $c/137$, teda v_1 je rádovo len stotinou rýchlosti svetla. To je dobre, lebo keby sa ukázalo, že v_1 je porovnateľná s rýchlosťou svetla, museli by sme brať do úvahy relativistické efekty, a to by zas znamenalo, že k základným veličinám musíme pridať aj rýchlosť svetla.

Napokon odhadnime ešte typickú veľkosť energie atómu vodíka. Môžeme ju nájsť buď postupom použitým už pre a_1 , v_1 alebo jednoducho tak, že hmotnosť elektrónu násobíme druhou mocninou rýchlosti v , (výsledky oboch postupov sa môžu odlišovať iba číselným koeficientom k a ten je aj tak presne neurčený).

Pre typickú energiu E_1 takto máme

$$E_1 = \frac{1}{2} m_e v_1^2 = \frac{1}{2} \frac{m_e (Ke^2)^2}{\hbar^2} = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,6 \text{ eV}$$

Aj tu by sme dostali výsledok, ktorý je toho istého rádu ako energetické rozdiely atomárnych hladín. Odhadnime ešte typický moment hybnosti. Typickou veličinou preň bude zrejme

$$m_e v_1 a_1 = \hbar$$

čo naznačuje, že kvantové vlastnosti sa prejavujú výrazne pri momente hybnosti. Práve táto skutočnosť mimoriadne povzbudila N. Bohra, keď vypracoval svoj model atómu.

Rádový súhlas a_1 , E_1 s typickými rozmermi atómov a s typickými hodnotami energií ukazuje, že teória, v ktorej sú m_e , \hbar , Ke^2 *základnými veličinami*, má reálnu nádej na úspech pri opise štruktúry atómu.

Práve to si uvedomil Niels Bohr, keď v roku 1913 kriticky skúmal existujúce modely atómu a vypracoval teóriu, v ktorej použil Planckovu konštantu. Pochopiteľne, „zapracovanie“ tejto univerzálnej konštanty do modelu vodíkového atómu zďaleka nebolo iba formálnou záležitosťou. Súvisela s ním myšlienka existencie diskretných energetických hladín a v ďalšom dôsledku kvantovanie momentu hybnosti elektrónu. Ale nech je táto myšlienka akokoľvek prevratná a hlboká, nebola by nič platná, keby z Bohrových výpočtov neboli vyšli prijateľné hodnoty fyzikálnych veličín, napríklad veľkosti atómu.

Bolo preto logické, že Niels Bohr si urobil najprv rozmerovú analýzu. V úvode článku *O stavbe atómov a molekúl* uprednostňuje Niels Bohr Rutherfordov model pred Thomsonovým, konštatuje však jeho nezlučiteľnosť s klasickou elektrodynamikou. Rutherfordov model môže byť východiskom novej teórie len vtedy, ak v mikrosвете neplatia zákony klasickej elektrodynamiky. Bohr pokračuje: „Nech napokon zmena pohybových zákonov elektrónov dopadne hocijako, zdá sa nevyhnutným zaviesť do týchto zákonov veličinu, ktorá je cudzia klasickej elektrodynamike, a to Planckovu konštantu, často tiež nazývanú *elementárne kvantum účinku*. Zavedením tejto veličiny sa podstatne zmení otázka o stabilite konfigurácie elektrónov v atóme, lebo táto konštantá má taký rozmer a veľkosť, že spolu s hmotnosťou a nábojom častíc môže Planckova konštantá poskytnúť dĺžku hľadanú rádovej veľkosti.“

Na jednoduchý vzťah medzi polomerom atómu, jeho hmotnosťou, nábojom a Planckovou konštantou na základe rozmerovej analýzy ako prvý upozornil brnenský rodák Arthur Erich Haas (1884–1941) na zasadnutí Viedenskej akadémie vied 10. marca 1910. Uverejnil o tom článok, ktorý N. Bohr vo svojom článku *O stavbe atómov a molekúl* z r. 1913 cituje. Po uverejnení Bohrovho článku nasledovala priateľská výmena listov medzi Haasom (ktorý bol vtedy profesorom v Lipsku) a Bohrom.

Kvantová mechanika pozmenila stanovisko k Bohrovmu polomeru vodíkového atómu v tom zmysle, že nejde o polomer kružnice, po ktorej sa elektrón v základnom stave pohybuje, ale o najpravdepodobnejšiu vzdialenosť elektrónu od vodíkového jadra. V kvantovej mechanike, ako ešte uvidíme, totiž neexistuje trajektória (dráha) elektrónu v zmysle klasickej mechaniky. To nič nemení na význame a plodnosti rozmerovej analýzy, s ktorou začal Bohr svoje úvahy v roku 1913. Bohrova rozmerová analýza, pravda, ani len nenaznačila, ako má nová teória vyzeráť. A to platí vo všeobecnosti. Rozmerová analýza

môže totiž poskytnúť iba vzťahy medzi rôznymi veličinami, ale nie mechanizmus, ktorý k nim vedie. A o tom budeme hovoriť v ďalších kapitolách.

Aby sa nezdalo, že metóda rozmerovej analýzy „schváli“ každú možnosť, ktorá sa jej navrhne, skúsme jej ponúknuť iný súbor veličín. Vyberieme m_e , Ke^2 , c , kde c je rýchlosť svetla. V tomto súbore nie je \hbar a pýtame sa teda, či by vlastnosti atómov nemohla vysvetliť relativistická (c je medzi vybranými veličinami) teória, v ktorej Planckova konštanta nemá podstatnú úlohu.

Začnime ako minule – výpočtom typického rozmeru. Z veličín m_e , Ke^2 , c môžeme zostrojiť len jednu veličinu rozmeru dĺžky, a to

$$r_0 = \frac{Ke^2}{m_e c^2} = 1,82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

Táto veličina je o viac ako 4 rády menšia ako typické rozmery atómov⁵⁶. Toto naznačuje, že teória, v ktorej Planckova konštanta nemá podstatnú úlohu, nemôže vysvetliť štruktúru atómov.

3.4 NIEKOLKO POZNÁMOK NA ZÁVER ODPORÚČANÁ LITERATÚRA

Rozmerová analýza je najjednoduchším prípadom kvalitatívnych úvah, s ktorými sa ešte v ďalšom stretneme. A ešte „vyšším typom“ takéhoto spôsobu myslenia sú myšlienkové experimenty, ktoré rozvíjali v novodobej fyzike najmä Einstein, Bohr a Heisenberg a vytvorili tak jedny z najkrajších teórií vo fyzike.

Rozmerovej analýze a kvalitatívnym úvahám sa však, na škodu vecí, venuje pri vyučovaní málo pozornosti, azda preto, že sa zdajú menej presné a hlboké ako deduktívne odvodzovanie rozličných vzťahov. Žiaľ nemáme dost' miesta na to, aby sme spomenutú medzeru zaplnili. Odporúčame preto čitateľovi, aby si sám skúsil „odvodiť“, rozmerovou analýzou niektoré zo vzťahov stredoškolskej fyziky, napríklad

- závislosť dráhy od času pri rovnomernej zrýchlenom pohybe,
- rýchlosť, ktorú dosiahne teleso pri voľnom páde z výšky h ,
- vzťah pre intenzitu poľa v kondenzátore tvorenom rovinnými platňami,
- vzťah pre energiu elektrostatického poľa, ktoré je budené nabitou guľou polomeru r ,
- vzťahy z ďalších častí stredoškolskej fyziky⁵⁷.

Napokon uvedieme ešte ľahko dostupnú literatúru, kde sa s metódou možno bližšie zoznámiť.

BRUK, J. – STASENKO, A.: Rozmerová analýza pomáha riešiť úlohy. *Kvant*, ročník 1981, č. 6.

KRIŠTÁL, N. D.: Rozmerová analýza. *Kvant*, ročník 1975, č. 1.

MIGDAL, A.: Výpočty bez výpočtov. *Kvant*, ročník 1979, č. 8.

Všetky tieto články v sovietskom časopise *Kvant* sú zrozumiteľne napísané a v prvom z nich je citovaná aj ďalšia literatúra.

⁵⁶ Fyzikálne r_0 odpovedá zhruba polomeru guľôčky, ktorá pri nabití nábojom e má elektrostatickú energiu rovnú výrazu $m_e c^2$

⁵⁷ Snáď by bolo dobré, keby raz niekto urobil užitočnú zbierku úloh zo stredoškolskej fyziky obsahujúcu najmä úlohy riešené rozmerovou a kvalitatívnou analýzou.

4 VLNOVÉ VLASTNOSTI ČASTÍC

4.1 ÚVOD

Mechanizmus zodpovedný za vznik kvantových stavov atómov sa objasnil dvoma rôznymi cestami. Prvá bola maticová mechanika Heisenberga, ktorá vznikla v r. 1925, druhá bola Schrödingerova vlnová mechanika z r. 1926. Čoskoro sa ale ukázalo, že obe, zdanlivo podstatne odlišné cesty, sú ekvivalentné. Tu budeme sledovať Schrödingerovu cestu, ktorá nadväzuje na geniálnu de Broglieho myšlienku o vlnových vlastnostiach častíc (r. 1924).

Na začiatku si pripomenieme niektoré vlastnosti vlnenia známe už z klasickej fyziky. Potom si všimneme bližšie de Broglieho hypotézu a napokon si povieme niečo o tom, ako sa potvrdila experimentom.

4.2 VLNY V KLASICKEJ FYZIKE

V klasickej fyzike sa neustále stretávame s objektmi dvoch typov: s časticami a s vlnami. Intuitívne pritom cítime, že sú to objekty principiálne odlišné. Neskôr uvidíme, že v kvantovej fyzike je situácia iná a rozdiel medzi týmito dvoma odlišnými pojmami sa stráca. Zistíme teda, v čom je rozdiel medzi vlnami a časticami v klasickej fyzike.

Pod časticou rozumieme zvyčajne teleso, ktorého rozmery môžeme v danom fyzikálnom procese zanedbať. Polohu častice – niekedy používame nie celkom šťastne zvolený termín hmotný bod – potom opisujeme v každom okamihu trojicou súradníc x, y, z . Poloha častice sa s časom mení, súradnice x, y, z sú funkciami času t a hovoríme, že teleso sa pohybuje po určitej trajektórii. Existencia určitej trajektórie je typická pre pohyb častice. V klasickej (newtonovskej) mechanike vonkajšie sily, ktoré pôsobia na časticu, určujú jej zrýchlenie v inerciálnom systéme a odtiaľ pri danej začiatočnej polohe a začiatočnej rýchlosti možno určiť celú trajektóriu častice. Túto predstavu poznáme tak dobre, že o nej ani netreba hovoriť podrobnejšie. Musíme si len uvedomiť, že táto predstava vznikla idealizáciou z našich skúseností s telesami, ktorých rozmery sú porovnateľné s rozmermi nášho tela alebo sú oveľa väčšie (planéty) a niet dôvodov očakávať, že musí platiť aj pre častice atómovej fyziky, ktorých hmotnosti sú o mnoho rádov menšie napríklad pre elektrón $m_e = 9 \cdot 10^{-31}$ kg.

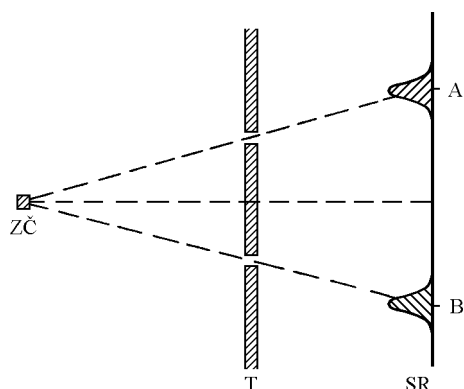
Druhým známym objektom klasickej fyziky sú vlny. Poznávame ich tiež z každodennej skúsenosti ako vlny na gumenej hadici, vlny šíriace sa na vodnej hladine, stojaté vlny na strunách hudobných nástrojov, elektromagnetické vlny prenášajúce rozhlasový či televízny signál, zvukové vlny atď.

Niektoré z týchto vln vidíme voľným okom a ani najmenej nepochybujeme, že to, čo sledujeme, je vlnový proces. Iné vlny voľným okom nevidíme a pýtame sa prirodzene, odkiaľ vlastne vieme, že daný jav je spôsobený vlnovým procesom a nie, napríklad, rojom častíc. Aby sme boli konkrétnejší: ako môžeme rozhodnúť, či sa televízny signál prenáša od vysielača k prijímaču vlnami a nie maličkými, okom neviditeľnými časticami? Kritériom, ktoré v rámci klasickej fyziky umožňuje rozlíšiť medzi vlnami a časticami, je jav typický pre vlnenie a nazývame ho interferenciou vlnenia. Ak určitý proces ukazuje v istých situáciách interferenciu, potom ho v rámci klasickej fyziky zaraďujeme medzi vlny, ak sa však interferencia v žiadnych okolnostiach neprejaví, hovoríme o časticách⁵⁸.

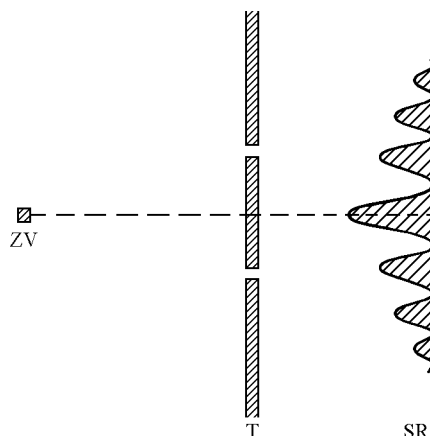
Rozdiel medzi vlnami a časticami snáď najlepšie vidno na jednoduchom príklade. Na obr. 4.1a je zdroj častíc, tienidlo s dvoma štrbinami a stena registrujúca miesto dopadu častíc. Na stene sa objavia dve čiary, pričom každá z nich je spôsobená časticami, ktoré prešli príslušnou štrbinou.

⁵⁸ Podľa týchto kritérií – ako sme uviedli v druhej kapitole – identifikovali katódové lúče ako prúd častíc (a až neskôr sa ukázalo, že tieto lúče majú aj vlnové vlastnosti). Typické vlnové vlastnosti, ako sú ohyb vlny na prekážke a pod., sú tiež prejavmi interferencie.

Na obr. 4.1b je zdroj vlnenia, opäť dve štrbiny a opäť stena (pri svetle fotografická platňa) registrujúca intenzitu dopadajúcich vln. Pri vhodnej voľbe podmienok experimentu (šírka štrbín, ich vzdialenosť, vzdialenosť platne od tienidla so štrbinami, dĺžka vlny) uvidíme na stene typický interferenčný obraz.

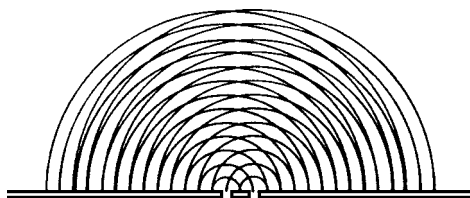


Obr. 4.1a Prechod častíc dvoma štrbinami. ZČ – zdroj častíc, T – tienidlo s dvoma štrbinami, SR – stena registrujúca miesta dopadu častíc. Veľkosť vyšrafovaných plôch pri stene zodpovedá počtu častíc dopadajúcich na dané miesto



Obr. 4.1b Interferenčný obraz vznikajúci pri prechode vlnenia dvoma štrbinami, ZV – zdroj vlnenia, T – tienidlo s dvoma štrbinami, SR – stena (fotografická platňa) registrujúca intenzitu dopadajúceho žiarenia

Schéma vzniku interferenčného obrazu⁵⁹ je na obr. 4.2. Tam, kde vlna prichádzajúca od prvej štrbiny núti častice prostredia kmitať jedným smerom a vlna od druhej štrbiny práve opačným smerom, vzniká interferenčné minimum. Tam, kde obe vlny núti častice prostredia kmitať v rovnakom smere, vzniká interferenčné maximum.



Obr. 4.2 Schéma vzniku interferenčného obrazu. Dve štrbiny sú zdrojmi vlnenia, kružnice so stredom v ľavej štrbine znázorňujú maximá vln šíriacich sa z tejto štrbiny, podobne pre pravú štrbinu. Tam, kde sa čierne čiary (maximá) pretínajú, vznikajú celkové maximá výsledného interferenčného obrazu

Pre rozdiel medzi prechodom častíc a vln sústavou dvoch štrbín je *podstatná* nasledujúca skutočnosť. Častica prechádza vždy len *jednou štrbinou*; ak prejde hornou, zanechá stopu v okolí bodu A (pozri obr. 4.1a), ak prejde dolnou, dopadne do okolia bodu B. Keby sme na určitý čas zakryli dolnú štrbinu a potom (na rovnaký čas) zakryli zas hornú štrbinu, dostali by sme podobný obrázok ako pri súčasne otvorených oboch štrbinách.

Vlna prechádza *obidvoma* štrbinami *súčasne* a interferenčný obraz je spôsobený práve skladaním vln prichádzajúcich od oboch štrbín. Keby sme na istý čas zavreli prvú štrbinu a potom zas otvorili prvú a zavreli druhú, na fotografickej platni by sa interferenčný obraz nevytvoril. Skôr by sme videli niečo podobné ako na *obr. 4.1a*.

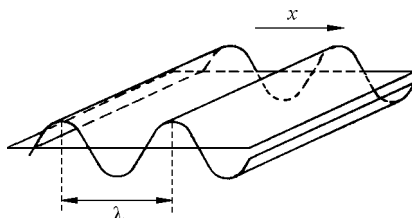
Interferencia vlnenia vedie k mnohým zaujímavým javom v optike aj v akustike, ale tu sa nimi nemôžeme zaoberať. Uvedieme len tie javy, s ktorými sa v ďalšom ešte stretneme.

⁵⁹ Už dávno sa vedelo, že dve vlny, ktoré sa stretnú, sa v niektorých miestach zosilňujú a v iných zoslabujú. Toto je najjednoduchší prejav interferencie vlnenia.

Rovinná monochromatická vlna. Týmto názvom označujeme periodický proces, ktorý má istú presnú hodnotu vlnovej dĺžky a určitú frekvenciu. Rovinná vlna, ktorá sa šíri v smere osi x v rovine xy , je znázornená na obr. 4.3. Opisuje ju výraz

$$u(x, t) = A \sin \left(2\pi \frac{x}{\lambda} - 2\pi \frac{t}{T} \right) \quad (1)$$

kde $u(x, t)$ je výchylka kmitajúceho prostredia z rovnovážnej polohy.



Obr. 4.3 Rovinná vlna šíriaca sa v smere osi x . Vlnová dĺžka λ , je vzdialenosť dvoch susedných maxim

Pritom λ , nazývame dĺžkou vlny a T periódou. Skutočne, ak sa pozrieme na vlnu na určitom mieste, povedzme $x = 0$, budeme mať funkciu

$$u(0, t) = -A \sin \left(\frac{2\pi t}{T} \right)$$

ktorá je periodická s periódou rovnajúcou sa práve T . Podobne, ak sa pozrieme na vlnu v určitom čase, pre jednoduchosť zoberme $t = 0$, dostaneme z (1) funkciu

$$u(x, 0) = A \sin \left(2\pi \frac{x}{\lambda} \right)$$

ktorá je periodickou funkciou v priestore, pričom v bode $x + \lambda$ nadobúda rovnakú hodnotu ako v bode x . Ak rovnica (1) opisuje vlnu v priestore, tak z toho, že (1) nezávisí ani od y ani od z , vidíme, že hodnota amplitúdy⁶⁰ vlnenia danej výrazom (1) je rovnaká v celej rovine

$$2\pi \frac{x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T} = \frac{2\pi x'}{\lambda} - \frac{2\pi t'}{T}$$

odtiaľ

$$\frac{x - x'}{T - T} = \frac{\lambda}{T} = v$$

$$2\pi \frac{x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T} = \text{konšt}$$

a v je práve fázovou rýchlosťou. Často používame aj ďalšie veličiny ako

$$\nu = \frac{1}{T}, \quad \omega = 2\pi \nu = 2\pi \frac{1}{T}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

kde ν je frekvencia, ω je uhlová frekvencia a k je veľkosť vlnového vektora (jeho smer je rovnobežný so smerom šírenia sa vlny). S týmito veličinami môžeme vzťah (1) zapísať nasledujúco

$$u(x, t) = A \sin (kx - \omega t) \quad (2)$$

a pre fázovú rýchlosť

$$v = \frac{\lambda}{T} = \frac{\omega}{k}$$

Ak sa vlna šíri v smere danom jednotkovým vektorom \mathbf{n} , kladieme $\mathbf{k} = 2\pi\mathbf{n}/\lambda$, a pre amplitúdu⁶¹ vlny namiesto (2) máme

$$u(\mathbf{r}, t) = A \sin (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

⁶⁰ Termínom „amplitúda“ označujeme okamžitú (a nie maximálnu) výchylku.

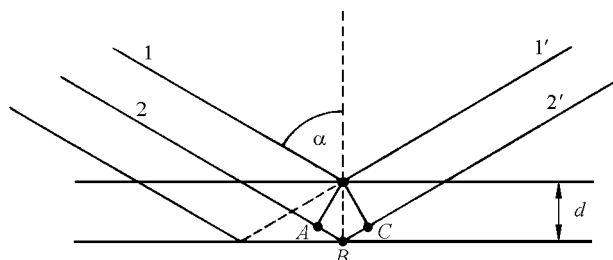
⁶¹ Pozri predchádzajúcu pozn. pod čiarou.

Odraz vlnenia od dvoch rovnobežných rovín

Ak rovinná vlna dopadá na dve rovnobežné a čiastočne priepustné vrstvy, potom pri niektorých uhloch dopadu pozorujeme silnejší a pri iných slabší odraz. Tento efekt je spôsobený interferenciou medzi vlnami odrazenými od hornej a od dolnej vrstvy. Situácia je znázornená na obr. 4.4. Intenzita odrazenej vlny je veľká, ak je splnená *Braggova podmienka*

$$2d \cos \alpha = n\lambda \quad (3)$$

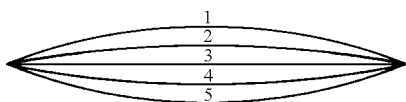
kde n je celé číslo $n = 1, 2, 3, \dots$ α je uhol medzi dopadajúcim lúčom a kolmicou k rovine odrážajúcich vrstiev, d je vzdialenosť medzi vrstvami. Tá istá Braggova podmienka platí aj pre odraz vlnenia od rovín tvorených v kryštále jednotlivými atómami.



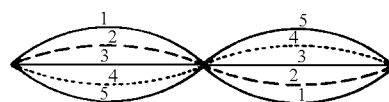
Obr. 4.4 Interferencia pri odraze rovinatej vlny od dvoch rovnobežných rovín. Rovinnú vlnu si predstavíme ako zloženú z niekoľkých lúčov. Dráha lúča 2 je o $AB + BC$ dlhšia ako dráha lúča 1. Lahko ukážeme, že $AB + BC = 2d \cos \alpha$. Ak je tento dráhový rozdiel rovný $n\lambda$, kde n je celé číslo, budú lúče po odraze navzájom „kladné“ (konštruktívne) interferovať

Stojaté vlny v jednom rozmere

Stojaté vlny vznikajú napríklad na strunách hudobných nástrojov pri čistých harmonických tónoch. Na obr. 4.5 sú číslicami 1, 2, ... znázornené postupné polohy struny pri najjednoduchšom harmonickom kmitaní struny a na obr. 4.6 je podobne rozkreslené kmitanie pri prvom vyššom harmonickom tóne. V ďalšom už nebudeme kresliť polohy, ktorými struna postupne prechádza, ale nakreslíme vždy len „krajnú“ polohu, ktorá odpovedá maximálnej výchylke.



Obr. 4.5 Postupné polohy kmitajúcej struny pri (základnom) harmonickom kmitaní. Struna prechádza polohami 1, 2, 3, 4, 5, 4, 3, 2, 1, 2, 3, ...



Obr. 4.6 Postupné polohy struny pri prvom vyššom harmonickom kmitaní. Struna prechádza polohami 1 až 5 a potom zas naspäť v opačnom poradí

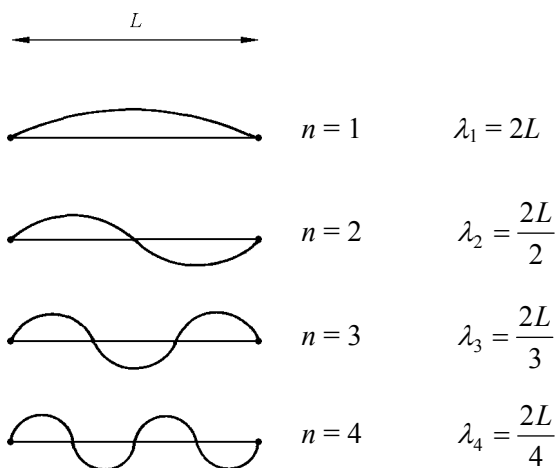
Niekoľko harmonických tónov je takto znázornených na obr. 4.7. Podstatné je, že vlnová dĺžka n -tého harmonického kmitu je daná vzťahom

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \quad (4)$$

a z toho vidno, že vlnové dĺžky čistých harmonických kmitov môžu nadobúdať len isté diskkrétne hodnoty.

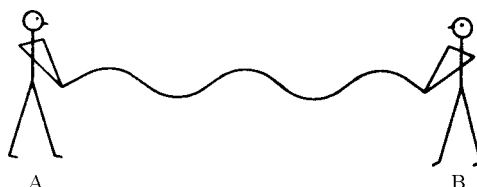
Vzťah (4) už, zdá sa, poznal aj Pytagoras, ktorý pripisoval „magické“ vlastnosti celým číslam. Preto sa pokladá nielen za zakladateľa matematiky, ale aj za zakladateľa teórie hudby.

Na obr. 4.6 a 4.7 vidno, že pri každom harmonickom kmitaní (s výnimkou prípadu $n = 1$) existuje niekoľko bodov, v ktorých sa struna nevychýľuje z rovnovážnej polohy. Tieto body sa nazývajú uzly alebo uzlové body. Pri n -tom harmonickom kmitaní je práve $(n - 1)$ uzlových bodov (koncové body nerátame). Stojaté vlnenie možno najjednoduchšie získať tak, že zoberieme dlhšiu gumenú hadicu a spolu s kolegom rozkmitáme oba jej konce (obr. 4.8). Ak oba konce rozkmitáme tou istou frekvenciou, podarí sa nám pri vhodných frekvenciách vybudovať stojatú vlnu.



Obr. 4.7 Najnižšie harmonické kmity na strune s dĺžkou L znázornené tak, že kreslíme len maximálnu výchylku. Každému kmitu patrí istá vlnová dĺžka daná vzťahom $\lambda_n = 2L/n$

Keby A (obr. 4.8) kmital koncom hadice a B by ju držal voľne, vznikla by postupná vlna šíriaca sa od A smerom k B. Keby len B kmital koncom hadice, vznikla by zas postupná vlna, ale tentokrát by sa šírila od B smerom k A. Pri súčasnom kmitaní oboma koncami vznikajú takto vlastne dve postupné vlny a ich zložením (interferenciou) vzniká stojatá vlna. Opíšeme si to trochu podrobnejšie⁶².



Obr. 4.8 Stojatá vlna na gumenej hadici

Podľa (2) vlnu postupujúcu v smere osi x opisuje výraz $A \sin(kx - \omega t)$. Vlna postupujúca opačným smerom je daná výrazom $A \sin(kx + \omega t)$. Ak oba výrazy zložíme, dostaneme

$$A \sin(kx - \omega t) + A \sin(kx + \omega t) = A \sin(kx) \cdot \cos(\omega t)$$

pričom sme použili vzťahy na skladanie trigonometrických funkcií⁶³.

Časový priebeh stojatej vlny je teda opísaný funkciou

$$B \sin(kx) \cdot \cos(\omega t) \quad (5)$$

kde B je konštanta (v našom prípade rovná $2A$). Prvý faktor v (5) udáva tvar stojatej vlny. Ak $\omega t = 0, 2\pi, 4\pi, \dots$ dostávame priamo výrazy úmerné

$$\sin(kx) = \sin\left(2\pi \frac{x}{\lambda}\right) = \sin\left(\pi \frac{x}{L} n\right) \quad (5')$$

kde sme v poslednom člene za λ , už dosadili hodnoty dané v (4). Tieto závislosti sú na obr.4.7. Druhý faktor v (5) udáva časovú závislosť stojatej vlny a ukazuje, že so stojatou vlnou je spojená určitá uhlová frekvencia ω . Hneď za (2) sme videli, že platí

$$\omega = vk = v \frac{2\pi}{\lambda} \quad (6)$$

kde v je rýchlosť, ktorou sa šíri po hadici postupná vlna. Pre čisté harmonické kmity však λ nadobúda len isté diskkrétne hodnoty, a preto podľa (6) bude aj ω nadobúdať len isté diskkrétne hodnoty, menovite

$$\omega_n = v \frac{2\pi}{\lambda_n} = v \frac{\pi}{L} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

pričom sme využili vzťah (4).

⁶² Ak sa čitateľovi zdajú niektoré matematické postupy v tomto článku náročné, môže ich preskočiť. Stačí, keď sa pozrie na obrázky a ich texty.

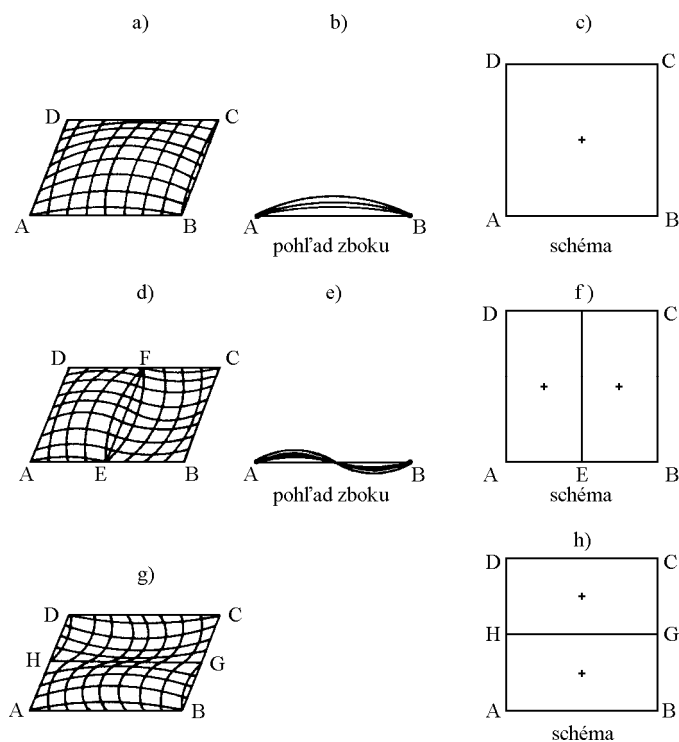
⁶³ Pripomenka: $\sin(\alpha + \beta) = \sin \alpha \cos \beta + \sin \beta \cos \alpha$, $\sin(\alpha - \beta) = \sin \alpha \cos \beta - \sin \beta \cos \alpha$. Sčítaním týchto vzťahov dostaneme $\sin(\alpha + \beta) + \sin(\alpha - \beta) = 2 \sin \alpha \cos \beta$

Vidíme teda, že každý čistý harmonický tón je charakterizovaný nielen určitou diskretnou vlnovou dĺžkou, ale aj určitou uhlovou frekvenciou⁶⁴. To napokon ani nie je veľmi prekvapujúce – hudobníci (aj amatéri) vedia, že čistým tónom zodpovedajú harmonické kmity a čisté tóny sú kmity s presne určenou frekvenciou.

Stojaté vlny v dvoch rozmeroch

Stojaté vlny, t. j. čisté harmonické kmity vznikajú nielen pri kmitaní strún, ale aj pri kmitaní dvojrozmerných objektov, akými sú kovové platne, mydlové blanky, koža na bubne a pod.

Najjednoduchšie ich možno opísať pri kmitaní obdĺžnikovej a štvorcovej blany upevnenej na okrajoch. Tri typy takýchto kmitov sú na obr. 4.9. Pri prvom type harmonického kmitu (prvý riadok na obr. 4.9) kmitá blanka tak, že sa najprv celá vychýli hore, potom prechádza rovnovážnou polohou – vtedy je celá v jednej rovine, potom sa celá vychýli dolu, vracia sa naspäť atď. Na časti a) je zakreslená blanka vtedy, keď sa celá vychýli nahor, na obrázku b) je pohľad na túto situáciu z boku a na obr. c) je tiež celá blanka vychýlená nahor. Ďalší harmonický kmit štvorcovej blanky je na obr. d), e), f). Celkový pohľad d) ukazuje blanku v stave, keď je časť AEFD vychýlená nahor a časť EFCB nadol. Pohľad z boku je na obr. e) a na obr. f) časť AEFD je takisto vychýlená nahor, a druhá polovica nadol. Počas kmitania to, čo je hore, ide dolu a naopak, podobne ako to bolo v jednorozmernom prípade na obr. 4.6. Časť blanky, ktorá sa nachádza na čiare EF, nekmitá, čiara EF je uzlovou čiarou. Kmity membrány znázornené na obr. 4.9d a na obr.4.9g sú dva rôzne kmity, ale ich frekvencia je rovnaká. Hovoríme o degenerácii. Ľahko vidno, že degenerácia súvisí s tým, že membrána je presne štvorcová. Keby bola obdĺžniková, už by tieto dva typy kmitov nemali rovnakú frekvenciu.



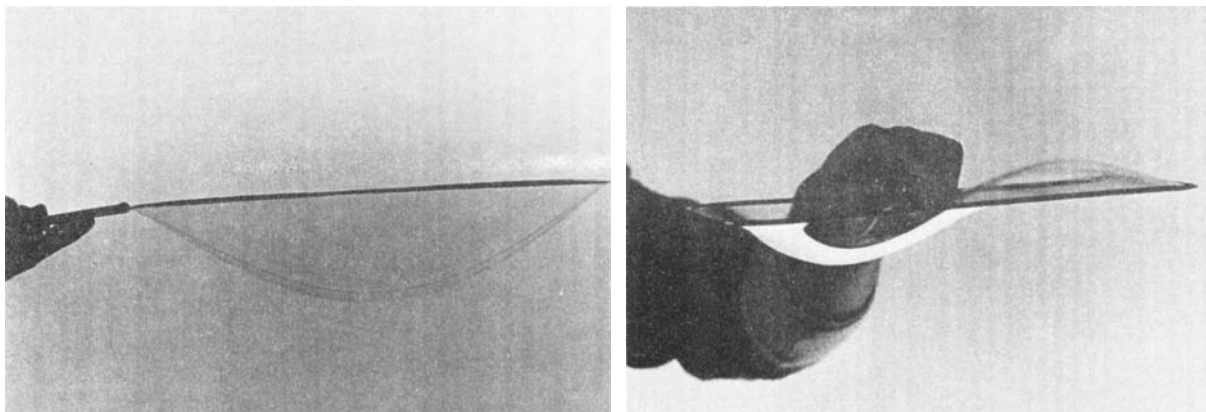
Obr. 4.9 Harmonické kmity štvorcovej membrány, platne alebo blany, pripevnenej na okrajoch. (Komentár k obrázkom je v texte)

Všeobecne sa s degeneráciou stretávame vtedy, ak má kmitajúca sústava istú symetriu. Degenerácia kmitov hrá dôležitú úlohu v kvantovej mechanike.

⁶⁴ Ak čistému harmonickému kmitu struny s dĺžkou L prisudzujeme určitú vlnovú dĺžku, dopúšťame sa istej nepresnosti, lebo pojem vlnovej dĺžky je, striktné vzaté, spojený s monochromatickou vlnou a tá ide „od nekonečna do nekonečna“, kým naša struna je predsa len konečná. Ale s týmto sa zatiaľ nebudeme trápiť a termín vlnová dĺžka budeme používať aj pre strunu. Pri pojme frekvencia takéto ťažkosti nevznikajú.

Kmity vo dvoch rozmeroch možno ľahko pozorovať na tenkých mydlových blankách⁶⁵. Na obr. 4.10 je výsledok.

Blanky na dost veľkých rámčekoch, povedzme 10 cm × 10 cm kmitajú pomaly a dôstojne, takže ich možno ľahko sledovať. Pri kmitaní kovových platní sú už kmity oveľa rýchlejšie a výchylky menšie, takže voľným okom sa kmity sledovať nedajú. Už dlho je ale známa metóda, ktorá umožňuje vidieť aspoň uzlové čiary. Vodorovnú kmitajúcu platňu posypeme jemným práškom, ktorý sa rýchlo usadí na uzlových čiarach (lebo tam platňa „nekmitá“). Tak vznikajú známe Chladniho obrazce. (E. F. F. Chladni, 1756–1827).



Obr. 4.10 Fotografie kmitajúcich mydlových (či saponátových) blankiek. Kmit na ľavom obrázku zodpovedá základnému kmitu a kmit na pravom obrázku prvému vyššiemu harmonickému kmitu

Matematický opis kmitajúcich platní alebo blankiek je veľmi podobný opisu stojatých vln na strune alebo na gumovej hadici. Uvedieme ho preto bez odvodzovania. Vyberieme súradnicovú sústavu tak, aby (pozri obr. 4.9) bod A bol v začiatku, os x má smer priamky AB , os y smer priamky AD . Blanku vyberieme ako obdĺžnik, pričom úsečka AB má dĺžku L_1 a úsečka AD dĺžku L_2 .

Pre stojatú vlnu na obr. 4.9a potom platí

$$u_{11}(x, y, t) = K \sin\left(\pi \frac{x}{L_1}\right) \sin\left(\pi \frac{y}{L_2}\right) \cos(\omega_{11}t)$$

Prvý činiteľ na pravej strane zodpovedá základnému harmonickému kmitu v smere osi x , druhý tiež základnému kmitu v smere osi y (porovnaj s (5')) a v časovej závislosti sme k uhlovej frekvencii ω pripísali indexy 11 preto, že v smere oboch osí máme základný harmonický kmit.

Stojatá vlna na obr. 4.9d bude opísaná výrazom

$$u_{21}(x, y, t) = K \sin\left(\pi \frac{x}{L_1} 2\right) \sin\left(\pi \frac{y}{L_2}\right) \cos(\omega_{21}t)$$

odlišujúcim sa od predchádzajúceho len tým, že v smere osi x už máme harmonický kmit číslo „2“. Prejavuje sa to dvojkou v prvej zátvorke a zmenou indexu pri uhlovej frekvencii.

Všeobecne bude stojatá vlna s $(n - 1)$ uzlami v smere osi x a $(m - 1)$ uzlami v smere osi y opísaná funkciou

$$u_{nm}(x, y, t) = \sin\left(\pi \frac{x}{L_1} n\right) \sin\left(\pi \frac{y}{L_2} m\right) \cos(\omega_{nm}t)$$

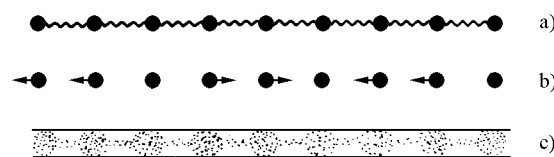
Schéma takejto stojatej vlny pre $n = 3$, $m = 4$ je na obr. 4.11.

⁶⁵ Recept na roztok: zmiešame asi 35 ml saponátu, napríklad PUR, so 4 ml glycerínu, výsledok zriedime 8 l vody a dobre zamiešame. Na zhotovenie kruhových a štvorcových rámčekov na blanky použijeme neizolovaný drôt priemeru asi 2 mm. Vhodný priemer rámčekov je okolo 30 cm. Za recept aj obrázky autori ďakujú prof. Alešovi Trojánkovi z gymnázia Velké Meziříčí a Márii Dojčanovej, bývalej poslucháčke matematiky a fyziky Univerzity Komenského v Bratislave.

D	+	-	+	C
	-	+	-	
	+	-	+	
A	-	+	-	B

Obr. 4.11 Schéma stojatej vlny v dvoch rozmeroch pri $n = 3$, $m = 4$. Význam schémy je rovnaký ako pri schémach na obr. 4.9

Pri jednorozmerných kmitoch sme našli aj vzťah medzi frekvenciou a vlnovou dĺžkou daného kmitu. Tu to nie je oveľa zložitejšie, ale nebudeme vzťah potrebovať. Podstatné je iba to, že aj v dvoch (aj v troch) rozmeroch má každá stojatá vlna presne určenú frekvenciu. Doteraz, keď sme hovorili o vlnách, ukazovali sme na príkladoch iba priečne vlny. Pri nich je výchylka určitého bodu (napr. na strune) kolmá na smer, ktorým sa šíri vlna. Okrem takýchto kmitov existujú aj pozdĺžne vlny, pri ktorých je výchylka daného bodu rovnobežná so smerom šírenia sa vlny. Pozdĺžne jednorozmerné vlny sú na obr. 4.12.



Obr. 4.12 V prvom riadku je sústava guľôčok spojených pružinkami, čo je asi najjednoduchšia sústava, na ktorej možno vybudovať pozdĺžne kmity. V druhom riadku b) sú znázornené výchylky guľôčok pri pozdĺžnom kmitu, ale pružinky sme už nezakreslili. V podstate celkom rovnako vyzerajú pozdĺžne kmity v kryštáli, len úlohu guľôčok majú atómy a úlohu pružiniek sily medzi nimi. V treťom riadku c) je znázornený pozdĺžny zvukový kmit v trubici naplnenej plynom. Kmit sa prejaví posunom častí plynu zo svojej rovnovážnej polohy, čo vedie k vytvoreniu striedajúcich sa oblastí s menšou a väčšou hustotou

Stojaté vlny v troch rozmeroch

Po tom, čo sme o stojatých vlnách v jedno- a dvojrozmerných úlohách hovorili podrobnejšie, budeme už v prípade trojrozmerných stojatých vln struční. Opísané vlny si môžeme predstaviť ako zvukové vlny v nádobe naplnenej plynom alebo ako ultrazvukové vlny v nádobe s kvapalinou. Vlnenie sa prejavuje tým, že v niektorých miestach je prostredie hustejšie a v iných redšie ako pred vznikom vlny. Ak hustotu v „bezzvlnovom“ stave označíme ρ_0 , potom hustotu v stave, keď už bola stojatá vlna vybudená, môžeme písať takto

$$\rho(x, y, z, t) = \rho_0 + A(x, y, z, t)$$

a odchýlka $A(x, y, z, t)$ má pre kváder s dĺžkami hrán L_1, L_2, L_3 tvar úmerný

$$\sin\left(\pi \frac{x}{L_1} n_1\right) \sin\left(\pi \frac{y}{L_2} n_2\right) \sin\left(\pi \frac{z}{L_3} n_3\right) \cos(\omega_{n_1 n_2 n_3} t)$$

Tento výraz odpovedá stojatej vlne danej trojicou celých čísel n_1, n_2, n_3 a prislúcha mu istá presne určená uhlová frekvencia $\omega_{n_1 n_2 n_3}$. Odporúčame, aby si čitateľ načrtol obrázky niekoľkých najnižších stojatých vln a porozmýšľal, ako sa pri nich budú striedať zhustenia a zrednutia prostredia.

Poznámka. To, o čom sme už hovorili, platí iba pre najjednoduchšie prípady. Napríklad pri kmitoch struny naše výsledky sú správne iba pre strunu, ktorá je po celej dĺžke „rovnaká“, t. j. všade zhotovená z rovnakého materiálu, má rovnakú hrúbku atď. Potom sú jej stojaté kmity naozaj opísané jednoduchou sínusovkou. Keby struna bola na niektorých miestach hrubšia alebo keby platne či blanky mali hrúbku alebo zloženie meniace sa od miesta k miestu, boli by veci komplikovanejšie. Ale aj vtedy, ako sa ukázalo podrobnými matematickými štúdiami v 19. storočí, by jedna, a to podstatná vec platila naďalej. Existovali by harmonické kmity (už nie čisté sínusovky, ale niečo zložitejšie) a každý z nich by mal určitú presne danú frekvenciu. A hoci to v 19. storočí fyzici a matematici nemohli tušiť, pre kvantovú mechaniku to bolo veľmi dôležité.

Skladanie dvoch vln s blízkymi vlnovými dĺžkami. Vlnové balíky

Vo vákuu sa modré svetlo šíri rovnako rýchlo ako červené či žlté – rýchlosť svetla nezávisí od vlnovej dĺžky. Ak sa však svetlo šíri v určitom prostredí, tak to nebýva pravdou, všeobecne je fázová rýchlosť funkciou vlnovej dĺžky vlnenia. Podľa (6) $\omega = vk$, kde ω je uhlová frekvencia rovná 2π -násobku obyčajnej frekvencie a k veľkosť vlnového vektora rovná $2\pi/\lambda$. Ak v závisí od λ , alebo – inak vyjadrené – ak v závisí od k , potom vzťah píšeme trochu všeobecnejšie

$$\omega = \omega(k) = v(k)k \quad (8)$$

Predstavme si teraz, že zložíme dve vlny, ktorých dĺžky a teda aj vlnové vektory a uhlové frekvencie sa od seba len o málo odlišujú. Pre určitosť môžeme vlny zapísať nasledovne

$$\text{prvá: } A \sin(k_1 x - \omega_1 t) \quad (9a)$$

$$\text{druhá: } A \sin(k_2 x - \omega_2 t) \quad (9b)$$

pričom $\omega_1 = \omega(k_1)$, $\omega_2 = \omega(k_2)$ a pre vlnové vektory $k_1 = 2\pi/\lambda_1$, $k_2 = 2\pi/\lambda_2$.

Vytvoríme teraz superpozíciu oboch vln. Pod superpozíciou rozumieme také zloženie vln, pri ktorom skladáme ich amplitúdy (a nie intenzity). Najprv je užitočné trochu skomplikovať označenie. Položme

$$k_1 = k + \Delta k; \quad \omega_1 = \omega + \Delta \omega \quad (10)$$

$$k_2 = k - \Delta k; \quad \omega_2 = \omega - \Delta \omega$$

Ak to urobíme, dostaneme

$$k_1 x - \omega_1 t = (kx - \omega t) + (\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$$

$$k_2 x - \omega_2 t = (kx - \omega t) - (\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$$

Výraz $(kx - \omega t)$ označíme na chvíľu ako α , výraz $(\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$ ako β a pre superpozíciu oboch vln platí

$$A \sin(k_1 x - \omega_1 t) + A \sin(k_2 x - \omega_2 t) = A [\sin(\alpha + \beta) + \sin(\alpha - \beta)]$$

S výrazom v hranatej zátvorke sme sa už v tomto článku stretli a vieme, že sa rovná $2 \sin \alpha \cos \beta$. Pre superpozíciu oboch vln potom dostaneme

$$2A \sin(kx - \omega t) \cos(\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t) \quad (11)$$

Prvý činiteľ je tu zas rovinná vlna, ktorá sa málo odlišuje od tých dvoch, ktoré sme skladali, druhý činiteľ je ale celkom iný. Pretože Δk aj $\Delta \omega$ sú malé, bude sa $\cos(\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$ len veľmi pomaly meniť.

Celé skladanie vln vidno na obr. 4.13. V každej vlne je rýchlo oscilujúca časť daná prvým činiteľom v (11) a pomalšie oscilujúci druhý činiteľ v (11). Funkcia $\cos(\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$ je na obr. 4.13c znázornená prerušovanou čiarou.

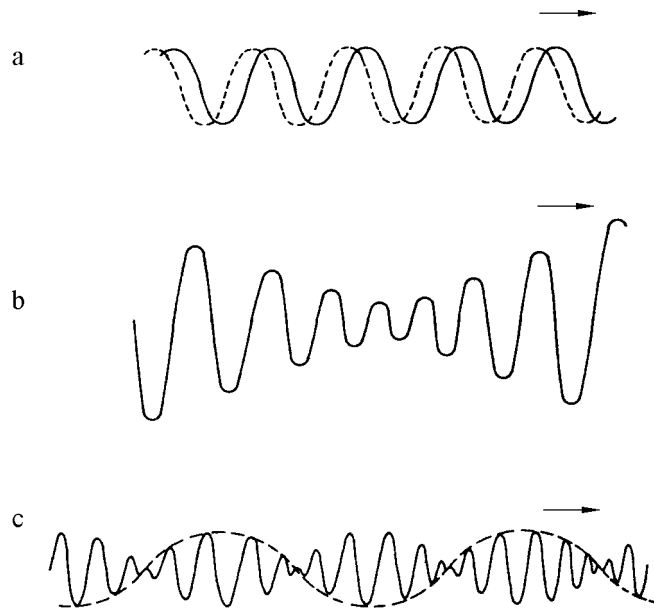
Superpozíciou dvoch vln takto vznikli isté trochu oddelené „vlnové balíky“. Zaujímame sa teraz o to, akou rýchlosťou sa budú balíky šíriť. Vidno to jednoducho zo vzťahu (11) a z obr. 4.13c. Maximum „balíka“ je tam, kde argument kosínusu je $0, \pi, 2\pi, \dots$. Vyberme napríklad ten balík, pre ktorý sa uvedený argument rovná nule. Máme tak

$$\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t = 0$$

a odtiaľ

$$\frac{x}{t} = v_g = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} \quad (12)$$

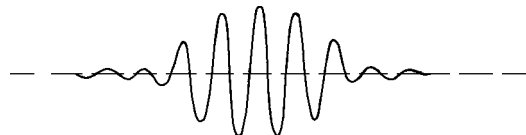
Rýchlosť, ktorou sa šíria opísané balíky, nazývame grupovou rýchlosťou. Odtiaľ pochádza aj index g v označení rýchlosti. Názov vznikol z toho, že balík bol vytvorený skladaním viacerých vln, teda grupou vln.



Obr. 4.13 Superpozíciou, t. j. zložením dvoch vln znázornených na časti a) dostávame výslednú vlnu, ako ju vidíme na časti b). Keby sme skladali o čosi kratšie vlny, dostali by sme výsledok z časti c). Význam prerušovanej čiary je vysvetlený v texte

V skutočnosti totiž možno balíky vytvárať skladaním nielen dvoch, ale aj viacerých vln. Ak vlny a ich amplitúdy šikovne vyberieme; môžeme superpozíciou dostať aj jeden jediný balík a nie celý rad balíkov ako na obr. 4.13c. Izolovaný balík by potom mohol vyzeráť napríklad tak, ako na obr. 4.14. Podrobnejšími úvahami, ktoré ale nebudeme robiť, sa dá ukázať, že pre balík vytvorený z úzkeho intervalu vlnových dĺžok platí pre grupovú rýchlosť zas vzťah (12), t. j.

$$v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} \quad (12)$$



Obr. 4.14 Jediný vlnový balík vytvorený skladaním mnohých vln s vlnovými vektormi z intervalu $(k - \Delta k, k + \Delta k)$ a s príslušnými uhlovými frekvenciami z intervalu $(\omega - \Delta\omega, \omega + \Delta\omega)$

4.3 DE BROGLIEHO HYPOTÉZA

V druhej kapitole sme hovorili o Einsteinovej hypotéze o kvantách elektromagnetického žiarenia. Hypotéza bola sformulovaná v r. 1905 a neskôr potvrdená podrobnými Millikanovými meraniami fotoelektrického javu a Comptonovým javom. Po týchto experimentoch bola už hypotéza všeobecne prijatá a kvantá elektromagnetického vlnenia sa nazývali fotónmi. Podľa Einsteinovej hypotézy sa monochromatická rovinná vlna s vlnovou dĺžkou λ , a uhlovou frekvenciou ω správava pri absorpcii a emisii svetla ako „roj“ fotónov, z ktorých každý mal energiu a hybnosť danú vzťahom

$$E = \hbar\omega, \quad p = \frac{E}{c} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \quad (13)$$

Lenže štruktúra atómov stále nebola vysvetlená, najmä nebol jasný mechanizmus zodpovedný za vznik kvantových stavov s diskretnými hodnotami energie. Einsteinovými vzťahmi vznikla vlastne

trocha nesymetrická situácia: fyzikálny obraz sveta obsahoval vlny, ktoré mali aj časticové“ vlastnosti a častice, ktoré boli „iba“ časticami.

V tejto situácii prišiel tridsaťdvaročný francúzsky fyzik Louis de Broglie s veľmi radikálnou novou myšlienkou, ktorá bola v istom zmysle fyzikálnym obrátením Einsteinových vzťahov pre fotóny. De Broglieho hypotéza viedla k „symetrickému“ obrazu: podľa nej každej voľnej častici, pohybujúcej sa s energiou E a hybnosťou p prislúcha rovinná monochromatická vlna s uhlovou frekvenciou ω a vlnovou dĺžkou λ , pričom

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (14)$$

Formálne sú de Broglieho vzťahy identické s Einsteinovými, ale obsahujú hlbokú a revolučnú myšlienku o vlnových vlastnostiach častíc.

Aby ju bolo možné prijať, treba hneď odpovedať na dve otázky (a de Broglie na ne aj odpovedal):

– Prečo neboli vlnové vlastnosti častíc už dávno pozorované? Odpoveď je v tom, že príslušné dĺžky vln sú veľmi, veľmi malé. Ak napríklad zoberieme teliesko hmotnosti 10^{-9} kg, ktoré sa pohybuje rýchlosťou $1 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1} = 10^{-2} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, dostaneme z druhého de Broglieho vzťahu výsledok

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{10^{-9} \cdot 10^{-2} \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}} = 6,6 \cdot 10^{-23} \text{ m}$$

a to je ďaleko pod hranicami experimentálnych možností. Pre elektrón, ako uvidíme o chvíľu, sú však vlnové dĺžky v oblasti prístupnej pozorovaniam. Druhá otázka je ťažšia.

– Aký je vzťah medzi rýchlosťou častice a rýchlosťou vlny, ktorá je tejto častici priradená? Má tento vzťah fyzikálny zmysel?⁶⁶

Rovinná vlna s uhlovou frekvenciou ω a dĺžkou vlny λ má fázovú rýchlosť

$$v_f = \frac{\lambda}{T} = \frac{2\pi/T}{2\pi/\lambda} = \frac{\omega\lambda}{2\pi}$$

kde T je perióda, s ktorou vlna kmitá. Za ω dosadíme E/\hbar , za λ podobne $2\pi\hbar/p$ a máme

$$v_f = \frac{E}{p}$$

Ak sem dosadíme výrazy pre energiu a hybnosť klasickej častice, t. j. $E = mv^2/2$, $p = mv$, dostaneme

$$v_f = \frac{1}{2}v$$

Na prvý pohľad by sa zdalo, že výsledok hovorí proti de Broglieho hypotéze, ale nie je to pravda. Analógiu klasickej častice nie je monochromatická vlna, ale vlnový balík, lebo klasická častica je úplne presne lokalizovaná v určitom bode a vlnový balík je tým, čím môžeme aspoň približne – dosiahnuť lokalizáciu vlnového procesu. Ak chceme priradiť častici nejaký typ vlny, musíme jej priradiť práve vlnový balík. Vlnový balík sa pohybuje grupovou rýchlosťou

$$v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} = \frac{\Delta E}{\Delta p} = \frac{E(p + \Delta p) - E(p)}{\Delta p} \quad (15)$$

kde sme využili (12) a ďalej to, že $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$. V (15) máme

$$E(p) = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

$$E(p + \Delta p) = \frac{(p + \Delta p)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} + \frac{p\Delta p}{m} + \frac{(\Delta p)^2}{2m}$$

⁶⁶ Pri prvom čítaní možno zvyšok článku vypustiť

Ak $\Delta p \ll p$, môžeme posledný člen zanedbať a z (15) dostaneme

$$v_g = \frac{p}{m} = v \quad (16)$$

Vidíme teda, že vlnový balík de Broglieho vln sa pohybuje rovnakou rýchlosťou ako voľná klasická častica, ktorej je balík priradený. Tento výsledok je potrebný na rozumnú fyzikálnu interpretáciu de Broglieho vln⁶⁷.

4.4 DE BROGLIEHO MYŠLIENKA O PÓVODE KVANTOVEJ PODMIENKY V BOHROVOM MODELI ATÓMU VODÍKA

V Bohrovom modeli atómu vodíka (pozri článok 2.6) bola pre získanie hodnoty energie pri pohybe elektrónu na n -tej povolenej dráhe podstatná podmienka

$$mvr = n\hbar \quad (17)$$

Podľa de Broglieho hypotézy bola s elektrónom spojená vlna s vlnovou dĺžkou

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (18)$$

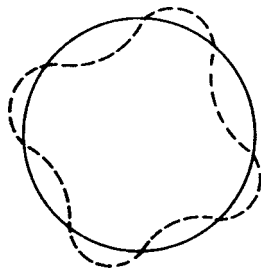
Pretože hybnosť p sa rovná súčinu mv , môžeme (18) zapísať aj ako

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} \quad (19)$$

Ak odtiaľto vyjadríme mv pomocou λ , a dosadíme do (17), dostaneme

$$2\pi r = n\lambda \quad (20)$$

Fyzikálny význam tohto vzťahu je jednoduchý. Na obvod n -tej dráhy elektrónu v atóme vodíka pripadá celočíselný počet de Broglieho vln. Pre $n = 4$ je situácia schematicky znázornená na obr. 4.15.



Obr. 4.15

Pri diskusii stojatých vln na strune v článku 4.2 sme videli, že pri stojatej vlne upevnenej na oboch koncoch musí na celú dĺžku struny pripadnúť celý počet polovln. Ľahko by sme sa ale presvedčili o tom, že pri stojatej vlne na pružnom drôte kruhového tvaru musí na obvod pripadnúť práve celočíselný násobok vlnovej dĺžky. De Broglieho myšlienka vyjadrená vzťahom (20) naznačovala, že skutočnou podstatou Bohrovej kvantovej podmienky (17) je to, že kvantovým stavom odpovedajú stojaté de Broglieho vlny. Myšlienka ale nebola ešte riešením problému, pretože bolo jasné, že v skutočnosti stojatá elektrónová vlna nemôže byť sústredená len na jedinú kružnicu v priestore, ale musí to byť skutočne trojroz-
merná vlna.

⁶⁷ Poznamenajme, že de Broglie v pôvodných prácach použil relativistickú kinematiku, pričom pre fázovú rýchlosť získal hodnotu väčšiu, ako je rýchlosť svetla. Bolo mu teda jasné, že fázová rýchlosť nemá nič spoločné s reálnym pohybom častice. Naproti tomu grupová rýchlosť, získaná z relativistických výpočtov, sa zhoduje so skutočnou rýchlosťou častice.

Naznačme ešte kvalitatívne, akým mechanizmom môže vzniknúť trojrozmerná stojatá elektrónová vlna v okolí protónu. Predstavme si, že energia elektrónovej vlny je E a zapíšme ju ako súčet kinetickej a potenciálovej energie

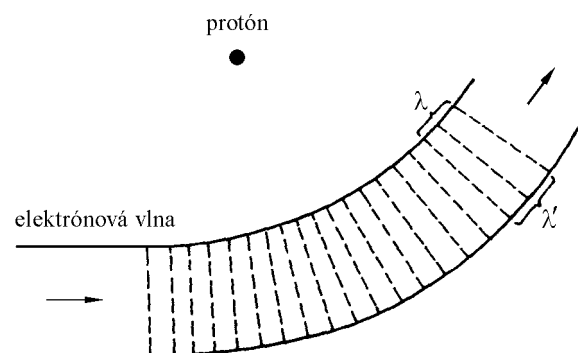
$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ke^2}{r} \quad (21)$$

Súčin $mv = p$ je hybnosť elektrónu a z rovnice (21) ľahko dostaneme

$$p = \left[2m \left(E + \frac{Ke^2}{r} \right) \right]^{1/2}$$

Odtiaľ vidno, že hybnosť elektrónu je väčšia, ak je r menšie, teda ak je elektrón bližšie k protónu. Vzhľadom na vzťah (18) ale väčšej hybnosti odpovedá kratšia vlnová dĺžka, a preto bude vlnová dĺžka elektrónovej vlny kratšia v menších vzdialenostiach od protónu ako vo väčších vzdialenostiach.

Predstavme si teraz, že elektrónová vlna prechádza okolo protónu. Smer šírenia vlny je vždy kolmý na smer vlnoplochy (plochy s konštantnou fázou). Pretože vlnová dĺžka je menšia pri menšej vzdialenosti od protónu, bude sa elektrónová vlna zahýbať smerom k protónu tak, ako je to znázornené na obr. 4.16. V tomto zmysle protón „príťahuje“ elektrónovú vlnu podobne, ako by príťahoval elektrón, keď by sme si ho predstavili ako bodovú časticu klasickej fyziky. Možno preto očakávať, že Coulombova príťažlivá sila môže vytvoriť stojaté elektrónové vlny podobne, ako môže byť zodpovedná za kruhové dráhy v Bohrovom modeli atómu. Na to, aby sa táto myšlienka dala verifikovať, je potrebné poznať rovnicu, podľa ktorej sa elektrónová vlna správa v Coulombovom silovom poli. Problém však vyriešil až Erwin Schrödinger a o tomto sa zmienime podrobnejšie v ďalšom.



Obr. 4.16

4.5 DAVISSONOV A GERMEROV EXPERIMENT

Mohli by sme sa domnievať, že „normálny“ vývoj určitej hypotézy je takýto: najprv je hypotéza sformulovaná, potom preskúšaná experimentom a ďalej – ak ju experiment potvrdí – možno ju vziať za základ ďalšej teórie. Osud de Broglieho hypotézy však ukazuje, že v skutočnom vývoji fyziky to býva aj inakšie. De Broglieho hypotézu postavil za východiskový bod svojej verzie kvantovej mechaniky⁶⁸ Schrödinger ešte prv, ako bola experimentom potvrdená. Jej experimentálne potvrdenie našli Davisson a Germer v experimentoch, ktoré boli zamerané na niečo iné a o de Broglieho hypotézu sa ich autori pôvodne nezaujímali. Davisson a Germer už od r. 1921 študovali odraz elektrónov od povrchu kovov. Až v r. 1925, po poruche a oprave zariadenia dopadal elektrón na povrch monokryštálu – predtým bol povrch kovu polykryštalický a vlnové vlastnosti elektrónov sa v ich experimente predtým výrazne neprejavovali.

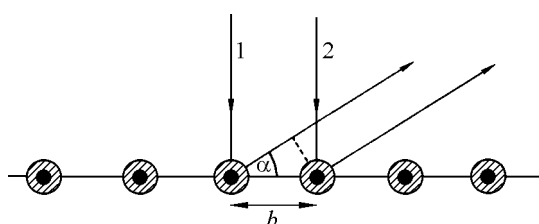
⁶⁸ Pripomeňme, že Schrödingera utvrdili v presvedčení o správnosti de Broglieho hypotézy aj staršie Hamiltonove práce, v ktorých študoval súvis vlnovej a geometrickej optiky (geometrická optika opisuje lúče podobne ako sa opisuje pohyb častíc) a pripomeňme tiež, že tesne pred Schrödingerovou formuláciou kvantovej mechaniky vznikla Heisenbergova. Skoro sa však ukázalo, že obe sú ekvivalentné.

V experimentoch Davissona a Germera bol vlnový charakter elektrónov dokázaný tým, že sa pozorovala interferencia de Broglieho vln. A ako sme už hovorili na začiatku 2. článku tejto kapitoly, objekt, ktorý ukazuje v istej situácii interferenciu, je podľa klasickej fyziky vlnou – toto by sa snáď dalo považovať aj za definíciu vlnenia v klasickej fyzike.

V pokusoch Davissona a Germera bola pozorovaná interferencia elektrónových vln pri odraze od pravidelne usporiadaných atómov na povrchu kryštálu niklu⁶⁹. Podrobná analýza experimentu je dosť komplikovaná, ale princíp vidno na obr. 4.17. Elektróny, ktoré sú urýchlené napätím niekto desiatok voltov, dopadajú na povrch kryštálu a dopadajúca vlna sa rozptyľuje na jednotlivých atómoch. Interferenciou sa vlna zosilní len v tých smeroch, pre ktoré bude dráhový rozdiel vln odrazených od jednotlivých atómov rovný celočíselnému násobku vlnovej dĺžky. V označeniach použitých v texte k obrázku to odpovedá vzťahu

$$b \cos \alpha = n\lambda \quad (22)$$

Výsledky experimentov Davissona a Germera potvrdili de Broglieho hypotézu a ukázali, že elektróny majú skutočne vlnové vlastnosti, pričom dĺžka vlny je daná de Broglieho vzťahom.



Obr. 4.17 Interferencia elektrónovej vlny pri odraze od povrchovej vrstvy atómov v kryštále. Vlna dopadá kolmo na rovinu atómov. Z obrázka vidno, že podmienkou interferencie lúčov 1 a 2 je $b \cos \alpha = n\lambda$, kde b je vzdialenosť atómov, α je uhol naznačený na obrázku, λ je de Broglieho dĺžka elektrónovej vlny

Vlnové vlastnosti elektrónov sa potvrdili aj v prácach G. P. Thomsona, ktoré boli publikované veľmi skoro po základných článkoch Davissona a Germera. Thomson študoval difrakciu rýchlych elektrónov na kryštáloch. Rýchle elektróny už prenikli do vnútra kryštálu a vznikajúci interferenčný obraz bol daný odrazom elektrónovej vlny od jednotlivých kryštalografických rovín. Úplná teória javu je aj tu zložitá, ale jej podstata je daná Braggovým vzťahom, s ktorým sme sa stretli v druhom článku tejto kapitoly.

Príklad 1. Elektrón je urýchlený rozdielom napätia U . Určite príslušnú dĺžku de Broglieho vlny.

Riešenie. Energia elektrónu bude eU , kde e je náboj elektrónu. Zo vzťahu

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = eU$$

máme

$$p = \sqrt{2meU}$$

Príslušná dĺžka vlny bude

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \sqrt{\frac{(2\pi\hbar)^2}{2meV}} \sqrt{\frac{1}{(U/V)}}$$

kde V označuje volt. Jednotku V sme vsunuli preto, aby výsledná vlnová dĺžka bola daná bezrozmerovým výrazom U/V (potenciálovým rozdielom vyjadreným vo voltoch).

⁶⁹ Podobnosti experimentu a jeho históriu možno nájsť v už citovanej knihe G. Trigg: *Crucial experiments in Modern Physics* (vydal van Nostrand r. 1971). Tu spomenieme len základnú myšlienku.

Peknú diskusiu o histórii aj súčasnosti interferencie elektrónových vln možno nájsť v troch článkoch Jiřího Komrska *Korpuskulárna optika ako experimentálne východisko pri výuke kvantovej mechaniky*, publikovaných v 1. až 3 čísle časopisu *Pokroky matematiky, fyziky a astro-nómie*, ročník 27, rok 1982.

Po dosadení

$$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

$$m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

dostaneme

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{U/V}} 10^{-10} \text{ m}$$

Výsledok ukazuje, že vlnové dĺžky elektrónov urýchlených napätím rádovo 100 V sú porovnateľné so vzdialenosťami medzi atómami v mriežke kryštálu, a preto sa vlnové vlastnosti elektrónov jasne prejavujú pri ich odraze od kryštálu alebo pri prechode kryštálom.

Príklad 2. Nájdite dĺžky de Broglieho vln pre elektróny urýchlené rozdielmi napätí:

a) $U = 1 \text{ V}$,

b) $U = 150 \text{ V}$,

c) $U = 22\,500 \text{ V}$.

Riešenie. a) $\lambda = 12,2 \cdot 10^{-10} \text{ m}$; b) $\lambda = 10^{-10} \text{ m}$; c) $\lambda = 0,081 \cdot 10^{-10} \text{ m}$.

Príklad 3. Pri akej energii bude mať

a) elektrón, b) fotón vlnovú dĺžku toho istého rádu ako rozmer atómu?

Riešenie. Dĺžka vlny elektrónu je daná vzťahom

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{E/\text{eV}}} \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Rozmer atómu je okolo 10^{-10} m . Pre elektrón s takouto dĺžkou vlny preto máme $E \approx 150 \text{ eV}$. Dĺžka vlny fotónu je daná vzťahom $\lambda = 2\pi\hbar/p = 2\pi\hbar c/E$, kde sme použili $E = pc$.

Odtiaľ

$$E = 2\pi\hbar c/\lambda$$

Ak sem dosadíme $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$, $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\lambda = 10^{-10} \text{ m}$, dostaneme $E = 12 \cdot 10^3 \text{ eV}$. Pri tejto vlnovej dĺžke bude energia fotónu asi 100-krát väčšia ako energia elektrónu.

Od čias prvých experimentov Davissona a Germera boli vlnové vlastnosti potvrdené v mnohých ďalších experimentoch:

– Už v r. 1927 publikoval George Paget Thomson (syn J. J. Thomsona) výsledky experimentov, v ktorých študoval prechod elektrónov cez tenké kovové vrstvy. Experimenty potvrdili tiež de Broglieho hypotézu.

– Stern v spolupráci s Knauerom a neskôr s Estermannom po dlhej a namáhavej práci dokázali v r. 1929 a 1930 vlnové vlastnosti atómov hélia a molekúl vodíka H_2 pri ich odraze od povrchu kryštálov.

– V nasledujúcich rokoch, v mnohých experimentoch v atómovej fyzike (napr. pri rozptyle elektrónov na atómoch), v jadrovej fyzike (napríklad pri rozptyle elektrónov a neutrónov na jadrách) aj vo fyzike elementárnych častíc a fyzike tuhých látok boli mnohokrát pozorované vlnové vlastnosti častíc, ktoré obsahovala de Broglieho hypotéza. Koncom 20. storočia potvrdila skupina A. Zeilinger vlnové vlastnosti fullerénov – molekúl skladajúcich sa zo 60 atómov uhlíka.

4.6 OD SPOROV O TOM, ČI SVETLO SÚ VLNY ALEBO ČASTICE K SÚČASNÉMU „VLNOVO-ČASTICOVÉMU“ NÁZORU NA SVETLO

O povahe svetla rozmýšľalo mnoho filozofov a fyzikov už od staroveku. Dejiny vývoja týchto názorov sú zaujímavou kapitolou v poznávaní prírody, a preto ich stručne opíšeme.

Grécky filozof *Empedokles z Akragantu*⁷⁰ (asi 493–433 pred n. l.) je zakladateľom emanačnej teórie. Podľa nej sa svetlo skladá z častíc vymršťovaných telesami. Platón hovoril o výronoch z telies a o

⁷⁰ Teraz Agrigento, prístavné mesto na juhu Sicílie.

tom, že obrazy vznikajú vtedy, keď sa tieto stretnú s výronmi z ľudského oka. Takéto výrony nemali byť obyčajného materiálneho charakteru.

Atomisti *Leukippos*, *Demokritos* a ich nasledovníci vrátane *Tita Lucretia Cara* považovali častice svetla za hmotné telieska – atómy. Ich názory prevzali mnohí arabskí stredovekí vzdelanci, menovite chýrny *Ibn Sina* (Avicenna 980–1037), ktorý považoval rýchlosť svetla za konečnú.

Aristoteles popieral názory atomistov aj *Platóna*. Šírenie svetla považoval za zmenu v priezračnom prostredí a možno ho považovať za predchodcu vlnovej teórie svetla. Aristotelove názory ovplyvnili fyzikálny obraz svetla až do 17. storočia.

Analógiu medzi šírením svetla a šírením zvuku či morských vln vyslovil ako prvý veľký taliansky maliar, staviteľ a polyhistor *Leonardo da Vinci* (1452–1519): „Každé teleso, ktoré sa nachádza vo vzduchu, vysiela svoje svetlo sféricky, ..., rovnako ako kameň hodený do vody, vytvorí stred a rôzne kruhy okolo neho a ako sa zvuk vo vzduchu šíri sféricky“.

Blízke k vlnovej teórii boli názory Reného Descarta, ktorý tvrdil, že svetlo sa šíri okamžitým tlakom éteru. Descartes prvý zostrojil umelú dúhu tak, že nechal prechádzať biele svetlo guľatou nádobou naplnenou vodou.

Francis Bacon tiež porovnával šírenie svetla so šírením zvuku, podobne ako *Francesco Grimaldi* (1618–1663), ktorý objavil ohyb svetla a tvrdil, že svetlo je vlnením jemného tekutého prostredia. Na Grimaldiho názory nadviazal významný anglický fyzik *Robert Hooke* (1635–1703).

Medzi Hookom a Newtonom boli dlhé spory o rôznych fyzikálnych problémoch, ktoré prechádzali až do nevraživosti. Svedčia o tom, že aj najväčší fyzici (a nielen fyzici) sú iba ľudia. Spor medzi Newtonom a Hookom viedol k situácii, ktorá je z dnešného hľadiska paradoxná. Zástanca korpuskulárnej teórie Newton na základe svojich pokusov s lomom svetla hranolmi tvrdil, že biele svetlo je zložené a že existuje nekonečné množstvo farieb. Zástanca vlnovej teórie Hooke považoval za základné farby iba dve: modrú a červenú a z nich, za spolupôsobenia tmy, mali vznikáť všetky ostatné farby.

Podľa súčasných názorov či požiadaviek má fyzikálna teória z niekoľkých základných zákonov alebo myšlienok vysvetliť mnoho faktov z danej oblasti a nijaké fakty z tejto oblasti by jej nemali protirečiť.

Navyše má teória aj predpovedať výsledky ďalších, ešte neuskutočených experimentov. Nie vždy to bolo tak. Podľa dnešných kritérií pokladáme za zakladateľa vlnovej teórie *Christiana Huygensa* (1629–1695) a za zakladateľa časticovej, t. j. korpuskulárnej teórie Isaaca Newtona. Huygens získal svetovú slávu aj v inej oblasti vynašiel kyvadlové hodiny a hodiny, v ktorých kyvadlo nahradil nepokojom.

Christian Huygens v roku 1678 napísal a o 12 rokov neskôr vydal *Traktát o svetle*, v ktorom sa objasňujú príčiny toho, čo sa s ním deje pri odraze a lome a zvlášť pri dvojlome v islandskom vápenci. Od Huygensa pochádza aj objav a prvá formulácia princípu nazvaného jeho menom: „... Každá čiastočka éteru, ku ktorej dospela vlna, vytvára novú menšiu vlnu, ... Súčasná formulácia princípu, s ktorou sa stretávame v úvodných kurzoch fyziky na vysokých školách, pochádza od Fresnela. Pomocou vlnovej teórie a svojho princípu Huygens našiel vysvetlenie zákonov geometrickej optiky.

Newton sa vo vtedajšom fyzikálnom svete uviedol experimentálnymi prácami v optike⁷¹. Spočiatku nemal vyhranený názor na povahu svetla a až neskôr sa priklonil k časticovej (korpuskulárnej) teórii. Čiastočne preto, že tento pohľad dával nádej na zahrnutie svetelných javov do rámca jednotnej stavby klasickej mechaniky tak, ako ju Newton opísal v *Matematických princípoch prírodnej filozofie* a čiastočne hádam aj preto, že *Robert Hooke*, s ktorým mal *Newton* neustále spory, zastával vlnovú teóriu.

Newton vysvetlil lom svetla čiste mechanicky. Ak svetelná častica prichádza na rozhranie medzi redším a hustejším prostredím, potom zo strany hustejšieho prostredia ju priťahuje viac molekúl a častica sa pri prechode z redšieho do hustejšieho prostredia urýchli. Podľa Huygensovej vlnovej teórie ale musí byť rýchlosť svetla v hustejšom prostredí menšia – čo je pekným príkladom na to, ako teórie vedú k predpovediam pre ešte neuskutočené experimenty. Na nešťastie sa experiment vtedy ešte nedal uskutočniť.

Je zaujímavé, ako *Newton* vysvetľoval odraz svetla od tenkých vrstiev, o ktorom je dnes dobre známe, že je to typický interferenčný jav. Podľa Newtona má pohybujúca sa častica svetla striedavo sklon (dispozíciu) k odrazu od rozhrania a sklon k prechodu rozhraním. Ak pri prechode tenkou vrstvou sú veci zariadené tak, že pri prechode vrstvou sa dispozícia práve zmení, potom sa častice budú často

⁷¹ Hoci dnes by sa mohlo zdať, že bol „čistý teoretik“, pretože je zakladateľom klasickej teoretickej mechaniky.

odrážať (buď sa odrazia už na hornom rozhraní alebo tam prejdú pri „sklone k prechodu“ a odrazia sa na dolnom rozhraní, lebo tam už budú mať „sklon k odrazu“).

Čitateľ si iste všimol, že táto zdanlivo absurdná teória je vlastne „predpoveďou“ typicky interferenčných vlnových vlastností, pravda, formulovaná v jazyku Newtonových svetelných častíc.

Newtonova korpuskulárna teória sa presadila a prevládala prakticky až do polovice 19. storočia. Bolo to jednak tým, že poskytovala nádej na zahrnutie svetelných javov do jednotného rámca newtonovskej dynamiky a jednak tým, že Huygensova teória mala slabé miesta a nebola plne rozvinutá. Huygens **1.** nepostrehol periodickosť svetelných vln a dôsledky periodickosti, **2.** nepoznal súvis medzi farbou svetla a jeho vlnovou dĺžkou **3.** nepoznal princíp interferencie a jeho dôsledky, **4.** vlnenie svetla považoval za pozdĺžne, takže nemohol vysvetliť polarizáciu svetla.

Naproti tomu Newton mal vysvetlenie aj pre dvojlom, lebo častice svetla mali mať dva páry pólov – podobne ako malé magnety a podľa toho, ako boli tieto „malé magnetiky“ orientované, dochádzalo v islandskom vápenci buď k riadnemu, alebo mimoriadnemu lomu. Preto, mimochodom, hovoríme dodnes o „polarizácii“ svetla. Názov pochádza od E. L. Malusa (1775–1812), ktorý bol zástancom Newtonovej teórie a až neskôr prevzala tento názov aj vlnová teória, v ktorej má ale termín „polarizácia“ – iný zmysel – označuje smer, v ktorom kmitá (priečne) vektor intenzity elektrického poľa.

Newtonovu korpuskulárnu teóriu zastávali a rozvíjali mnohí vynikajúci matematici a fyzici 18. a 19. storočia, napr. *Pierre Louis Simon de Laplace* (1749–1827), *Jean Baptiste Biot* (1774–1862) a *Siméon Denis Poisson* (1781–1840).

Z významných fyzikov a matematikov ostali vlnovej teórii verní *Leonhard Euler*, *Lomonosov* a *Franklin*. Euler ako prvý postrehol význam periodickosti svetelných vln, pravda, podobne ako Huygens, považoval vlnenie éteru za pozdĺžne.

Zakladateľom modernej vlnovej teórie svetla bol muž s encyklopedickými vedomosťami (aj ho nazývali „chodiacou encyklopédiou“), polyhistor *Thomas Young*, pôvodným povoláním lekár. Narodil sa 13. júna 1773 v Milvertone pri Tauntone v grófstve Somersetshire v Anglicku. V roku 1799 napísal pojednanie *Pokusy a problémy týkajúce sa zvuku a svetla*, v ktorom hovorí o dôkaze interferencie zvukových vln. O dva roky neskôr na základe analógie so zvukom hovorí o interferencii svetla a podáva správne vysvetlenie Newtonových krúžkov. V časopise *Edinburgh Review* názorne opísal interferenciu vln na vodnej hladine a pokračoval: ... „Tvrdím, že podobné javy sa vyskytujú vždy, keď sa dva diely svetla pomiešajú, a tieto javy nazývam všeobecným zákonom interferencie svetla“. Young potom experimentálne dokázal interferenciu svetla vychádzajúceho z jedného zdroja a prechádzajúceho dvoma malými otvormi v tienidle a na základe týchto pokusov určil obdivuhodne presne vlnovú dĺžku. Pre červené svetlo napríklad našiel 1/36 000 anglického palca, t. j. asi 700 nm a pre fialové svetlo 1/60 000 palca (420 nm). Thomas Young teda rozhodne patrí medzi velikánov fyziky – vysvetlil základné vlastnosti svetla, ktoré všetci poznáme z každodennej skúsenosti. Farebné krúžky na olejových škvrnách alebo na spenenom povrchu čiernej kávy si všimne každá gazdinka, veľký Isaac Newton ich prvý experimentálne vytvoril pomocou šošoviek, ale až Thomas Young prišiel na skutočnú príčinu týchto javov. Na veľkosti pridáva Youngovi aj to, že bol a ostal nadhlo so svojimi názormi celkom osamotený⁷².

Istý čas sa dokonca zdalo, že vlnová teória svetla je úplne vyvrátená. To bolo v roku 1808, keď Malus objavil polarizáciu svetla pri odraze od skla a vody. Young musel priznať: „V súčasnej forme nestačí vlnová teória vysvetliť všetky svetelné javy“. Vtedy ešte vari ani nevedel o tom, že 10. mája 1788 sa narodil v obci Broglie v departmente Eure vo Francúzsku chudorľavý chlapec *Augustin-Jean Fresnel*, ktorý sa stal inžinierom a za vlády Napoleona Bonaparta staval cesty v južnom Francúzsku. Keď Fresnela z politických dôvodov v r. 1815 dočasne suspendovali – našťastie s plným platom – utiahol sa do obce Mathieu pri Caen, kde objavil nezávisle od Younga zákon ohybu svetla. Fresnelove práce by pravdepodobne ostali nepovšimnuté, keby nebolo objavu popredného parížskeho matematika a fyzika Dominiquea Francoisa Araga (1786–1853). Arago objavil v roku 1811 chromatickú polarizáciu. Čiastočne polarizované svetlo, ktoré prichádza z modrej oblohy, má schopnosť rozštiepiť sa na dva lúče, ktoré sú rôzne (a to komplementárne) zafarbené, ak toto svetlo prejde cez tenkú lomivú vrstvu a analyzátor. Arago, ktorý do tých čias spolupracoval na korpuskulárnej teórii svetla s Biotom, priklonil sa k vlnovej teórii a zblížil sa s Fresnelom. Fresnel prichádza do Paríža a sústavne pracuje na svojej vlnovej teórii.

⁷² Vari aj dejiny fyziky sa zachovali voči nemu macošsky. Podobne, ako o jeho veľkom predchodcovi Robertovi Hookovi, sa v súčasnej fyzike hovorí o ňom iba v súvislosti s teóriou pružnosti tuhých telies (Youngov modul pružnosti).

Pre rok 1819 vypísala Parížska akadémia vied cenu za experimentálne a matematické výskumy ohybových javov. Fresnel sa prihlásil do súťaže a zaslal oveľa širšie koncipovanú prácu, v ktorej porovnal korpuskulárnu a vlnovú teóriu a naznačil spôsob výpočtu intenzity svetla pri ohybe. Poissonovi sa podarilo pre dva špeciálne prípady doviest' výpočty do konca a Fresnelove experimenty potvrdili výsledky výpočtov.

Fresnel sa ďalej spolu s Aragom venoval teórii interferencie polarizovaného svetla. Napokon – proti názorom Araga – vypracoval teóriu, v ktorej bolo svetlo priečnym vlnením éteru. Táto odvážna teória ale musela éteru predpísať vlastnosti, ktoré podľa zákonov hydrodynamiky „normálne“ prostredie nemohlo mať (až oveľa neskôr sa ukázalo, že éteru niet, vtedy však v neho fyzici neoblomne verili, lebo keď je raz svetlo vlna, tak musí existovať niečo, čo sa vlní – a to mal byť práve éter).

Fresnel sa nedožil všeobecného uznania svojej teórie a zomrel ani nie 40-ročný 14. júla 1827. O dva roky neskôr, 10. mája 1829, zomrel 56-ročný Thomas Young. Ich vlnová teória, vrátane hypotézy priečných vln, úspešne prechádzala experimentálnymi testami a získavala ďalších a ďalších stúpenčov.

Dlhú diskusiu o tom, či je svetlo vlna alebo roj častíc, dočasne zakončili pokusy J. B. L. Foucaulata (1819–1868) a A. H. L. Fizeaua (1819–1896), ktorí v rokoch 1849–1851 dokázali, že rýchlosť svetla vo vode je menšia ako vo vzduchu. A to bolo práve miesto, v ktorom sa predpovede Huygensa a Newtona podstatne odlišovali.

Staručký Biot (zomrel r. 1862) sa dožil úplného vyvrátenia teórie, za ktorú dlhé roky bojoval. V roku 1856 povedal Fresnelovmu bratovi: „Akú nádhernú intuíciu ukázal Váš brat, keď sformuloval ten plodný pojem priečných kmitov svetelných vln“.

Ďalšiu históriu už čitateľ pozná: Maxwell zo svojich rovníc odvodil existenciu priečných elektromagnetických vln a ukázal, že tieto vlny sa vo vákuu musia šíriť rýchlosťou svetla. Viditeľné svetlo považoval za elektromagnetické vlnenie s vlnovými dĺžkami z intervalu, ktorý určil už *Thomas Young*. *Heinrich Rudolf Hertz* potom v roku 1888 prvý raz v histórii vyslal elektromagnetické vlny a dokázal, že sa lámu, odrážajú a interferujú podľa tých istých zákonov ako viditeľné svetlo.

Zdalo sa, že problém podstaty svetla je už definitívne vyriešený, keď *Albert Einstein* v r. 1905 prišiel s novým pohľadom na svetlo. Einstein zaujal toto stanovisko: pokiaľ ide o šírenie svetla a interferenčné javy s ním spojené, platí plne Maxwellova teória. Ale pri pohlcovaní a vyžarovaní elektromagnetických vln sa energia prijíma a odovzdáva po istých kvantách, ktoré by sa ľahko opísali tak, že svetlo sa skladá z „častíc“ (Gilbert N. Lewis ich v r. 1926 nazval fotónmi), z ktorých každá má určitú energiu a hybnosť.

Svetlo teda ukazuje zároveň vlastnosti, ktoré by sme v klasickej fyzike priradovali aj vlnám (interferencia) aj časticiam („porcie“ energie a hybnosti). Úspešné zjednotenie týchto zdanlivo si odporujúcich vlastností svetla podáva až kvantová teória. Podľa nej svetlo nie je ani vlnou klasickej fyziky, ani časticou klasickej fyziky, ale kvantovým objektom, ktorý má v niečom vlastnosti klasických vln a v niečom vlastnosti klasických častíc.

A podobne je to aj s elektrónmi a inými časticami. De Broglieho vlny, ktoré im sú priradené, tiež nie sú vlnami klasickej fyziky, ale majú podstatne odlišný zmysel. O tom však ešte budeme hovoriť.

4.7 VÝZNAMNÉ POSTAVY 4. KAPITOLY

Lord Rayleigh, do r. 1873 *John William Strutt*, sa narodil v Langford Grove v grófstve Essex 12. novembra 1842. Po absolvovaní univerzity v Cambridgi pôsobil vo svojom sídle v Terling Place pri Withame, kde si vybudoval laboratórium. V rokoch 1879–1884 bol profesorom fyziky a po Maxwellovi druhým riaditeľom Cavendishovho laboratória v Cambridgi. V rokoch 1905–1908 bol prezidentom Royal Society. Zomrel 30. júna 1919 vo Withame (Essex).

Zaoberal sa najmä teóriou šírenia zvuku a svetla, klasickou termodynamikou a štatistickou fyzikou. Skúmal rozptyl svetla v zemskej atmosfére a dokázal, že žiarivá energia, ktorá je rozptýlená na molekulách vzduchu, je nepriamo úmerná štvrtéj mocnine vlnovej dĺžky svetla. Tým vysvetlil, prečo je obloha modrá. (Rozptyl v modrej časti svetla je väčší ako v žltočervenej.) Zaoberal sa žiarením absolútne čierneho telesa a vypracoval klasickú teóriu, ktorá viedla k ultrafialovej katastrofe, o ktorej sme hovorili v druhej kapitole⁷³. Spolu s Williamom Ramsayom (1852–1916) objavil v r. 1894 vzácny plyn argón, za čo mu r. 1904 udelili Nobelovu cenu za fyziku a Ramsayovi za chémiu.

⁷³ Negatívne výsledky boli v dejinách fyziky veľmi podnetné. Východisko z ultrafialovej katastrofy našli fyzici v kvantovej teórii.

Vzhľadom na problémy, ktorými sa zaoberáme v tejto knihe, zasluhuje si dielo lorda Rayleigha pozornosť ešte v súvislosti s dvoma otázkami.

Rayleigh nadviazal na Galileiho a Newtonov princíp podobnosti, pričom upozornil na veľký význam rozmerovej analýzy, ktorá s ním úzko súvisí. V r. 1915 napísal: „Často sa divím tomu, že aj veľmi významní vedci venujú nepatrnú pozornosť dôležitému princípu podobnosti. Nezriedka sa stáva, že výsledky namáhavých výskumov sa podávajú ako novoobjavené „zákony“, ktoré bolo možné získať apriórne za „niekoľko minút“ (z rozmerovej analýzy). Do dejín fyziky vošli Rayleighove úlohy na riešenie rôznych teoretických problémov pomocou rozmerovej analýzy. Niektoré príklady, ktoré uvádzame v tretej kapitole, sú modifikáciou Rayleighových úloh.

Druhá otázka, na ktorú chceme osobitne upozorniť; je Rayleighov príspevok k riešeniu problematiky vzťahu medzi fázovou a grupovou rýchlosťou svetla. Už Maxwell a Gabriel Stokes rozlišovali medzi fázovou a grupovou rýchlosťou vlnového procesu. Vzťahy $v_f = \frac{\omega}{k}$, $v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$ pre veľmi malé

Δk v disperznom prostredí odvodil v r. 1877 lord Rayleigh. Zaujímavé je experimentálne potvrdenie uvedených vzťahov. Albert Abraham Michelson (1852–1931) zmeral rýchlosť svetla vo vode a potvrdil Foucaultove a Fizeauove výsledky – a teda aj vlnovú teóriu svetla. V r. 1883 opakovane merania rýchlosti svetla, ale pre zmenu v sulfide uhličitom.

Na svoje prekvapenie nenameral očakávané hodnoty. Lord Rayleigh a Josiah Willard Gibbs (1839–1903) však ukázali, že Michelsonove výsledky sa zhodujú s teóriou, ak sa zoberie do úvahy nie fázová, ale grupová rýchlosť svetla (so zreteľom na jeho veľkú disperziu, teda veľkou závislosťou ω od k v sulfide uhličitom). Rayleighove myšlienky o grupovej rýchlosti využil vo svojich prácach neskôr Louis de Broglie.

Prince (princ) *Louis Victor Pierre Raymond de Broglie* sa narodil 15. augusta 1892 v Dieppe. Po maturite v r. 1909 sa zapísal na Sorbonnu na Faculté des Lettres. Študoval paleografiu, zaoberal sa stredovekými dejinami a v diplomovej práci sa venoval problémom výkonu kráľovskej moci začiatkom 18. storočia. Pod vplyvom populárnych spisov Henriho Poincarého (1854–1912) a na popud svojho brata Mauricea de Broglieho (1875–1960) zmenil svoje záujmy. Začal študovať matematiku a fyziku so zameraním na teoretickú fyziku a v r. 1913 získal diplom na fakulte prírodných vied v Paríži.

V rokoch 1913–1919 (a teda počas celej prvej svetovej vojny) slúžil v armáde, prevažne pri bezdrôtovej telegrafii. Bol vtedy pri zrode a vývoji prvých elektrónok.

V roku 1919 začal pracovať v laboratóriu svojho staršieho brata Mauricea a do r. 1923 uverejnil v zborníkoch Parížskej akadémie vied Comptes Rendus v spolupráci s bratom a aj sám sériu prác o röntgenových spektrách a fotoelektrickom efekte. V tomto období sa začal venovať kvantovej teórii, na ktorú ho upozornil brat Maurice už v r. 1911, keď mu dal čítať referáty, ktoré odzneli na prvom Solvayovom⁷⁴ kongrese v Bruseli.

Pod vplyvom Einsteina a článkov Marcela Brillouina (1854–1948) hľadal Louis de Broglie súvislosti medzi vlnovým a korpuskulárnym aspektom elektromagnetického žiarenia a zaoberal sa myšlienkou uplatniť tento dualistický pohľad aj na častice s nenulovou pokojovou hmotnosťou. Na túto tému uverejnil v r. 1923 v Comptes Rendus tri články, ktoré nevzbudili nijakú pozornosť. Myšlienky a výpočty z týchto článkov zhrnul potom do svojej dizertačnej práce, ktorú obhájil na Sorbonne 25. novembra 1924. Práca vyšla v r. 1925 v Annales de Physique pod nadpisom Výskumy o kvantovej teórii. Predsedom dizertačnej komisie bol Jean Perrin a jej členom bol významný teoretický fyzik Paul Langevin (1872–1946). Komisia hodnotila prácu veľmi kladne, hoci jej členovia nepredpokladali, že sa experimentálne potvrdia vlnové vlastnosti mikročastíc. Ďalší člen komisie Charles Mauguin po rokoch priznal, že neveril vo fyzikálny význam de Broglieho vln. „Videl som v nich“ – pokračoval⁷⁵ – „skôr čisté výtvary rozumu, ktoré boli zaujímavé, lebo prvý raz umožnili prekročiť hranice iba skúsenostných kvantových pravidiel, pre ktoré uviedli jednoduché pôsobivé vysvetlenie, analogické zákonom kmitajúcich strún“.

Azda by aj táto práca ostala nepovšimnutá, keby na ňu Langevin nebol upozornil Einsteina. Einstein vzápätí obširne citoval de Broglieho myšlienky ako veľmi perspektívne. Ovplyvnil tým aj Erwina Schrödingera, ktorý rozviedol de Broglieho idey a formuloval základnú rovnicu kvantovej mechaniky – Schrödingerovu rovnicu.

⁷⁴ Ernest Solvay (1838–1922) založil fond, ktorého prostriedky sa používajú na medzinárodné kongresy špičkových fyzikov. Jedným zo sekretárov prvého kongresu v dňoch 30. októbra až 3. novembra 1911 bol Maurice de Broglie.

⁷⁵ Cit. podľa Mauguin, Ch.: Louis de Broglie's Doktorthese, v zborníku *Louis de Broglie und die Physiker*. Hamburg: Classen Verlag, 1955.

Vráťme sa však k de Broglieho dizertačnej práci, ktorá sa začína slovami: „História optických teórií ukazuje, že vedecký názor dlho kolísal medzi mechanickým a vlnovým ponímaním svetla. Možno však je medzi oboma týmito názormi oveľa menšie protirečenie ako sa voľakedy myslelo⁷⁶. Zdá sa najmä, že taký názor potvrdzuje vývoj kvantovej teórie“. Planckov vzťah $E = \hbar\omega$ pre energiu svetelného kvanta bol v dvadsiatych rokoch potvrdený už mnohými experimentmi. De Broglieho základná myšlienka, tak ako sme o tom už hovorili, spočívala v použití uvedeného vzťahu aj pre elektróny a iné častice s nenulovou pokojovou hmotnosťou. Po potvrdení vlnových vlastností častíc Davissonom a Germerom udelili Louisovi de Brogliemu v r. 1929 Nobelovu cenu. Od r. 1932 bol L. de Broglie profesorom parížskej univerzity vied a riaditeľom Ústavu Henriho Poincarého, od r. 1933 bol členom Francúzskej akadémie vied. Zomrel 19. marca 1987 v Paríži.

Henri William Bragg sa narodil vo Westwarde (Cumberland) 2. júla 1862. Študoval v Cambridgei, potom bol profesorom fyziky v Adelaide v Austrálii. Od r. 1915 pôsobil v Londýne, v rokoch 1935–1940 bol prezidentom Royal Society. Na základe difrakcie röntgenových lúčov spolu so svojim synom v r. 1912 začal ako prvý skúmať kryštalickú štruktúru látok. Rozpracoval metódu röntgenografickej analýzy štruktúry kryštálov, metódu krútiaceho sa kryštálu. Zostrojil röntgenový spektrometer na výskum röntgenových spektier. Za významný príspevok k štúdiu štruktúry kryštálov pomocou röntgenových lúčov mu udelili v r. 1915 spolu so synom Nobelovu cenu za fyziku. Zomrel 12. marca 1942 v Londýne.

Lawrence William Bragg, syn H. W. Bragga sa narodil v Adelaide 31. marca 1890. Študoval v Adelaide a v Cambridgei. V rokoch 1919–1937 bol profesorom v Manchestri, neskoršie bol riaditeľom Cavendishovho laboratória v Cambridgei a riaditeľom Royal Institution. Zomrel 1. júla 1971 v Ipswichu.

Spolupracoval s otcom pri výskume difrakcie röntgenových lúčov a v r. 1913 odvodil vzťah medzi vlnovou dĺžkou röntgenovského žiarenia a periódou mriežky kryštálu. Je zakladateľom štruktúrnej analýzy bielkovín, spoluzakladateľom nových vedných odborov, rádioastronómie a molekulárnej biológie.

Clinton Joseph Davisson sa narodil v Bloomingtone (Illinois USA) 22. októbra 1881. Študoval v Chicagu a v Princetone, pracoval v laboratóriu Bell-telephone, od r. 1946 bol profesorom Virginskej univerzity. Zomrel 1. februára 1958 v Charlottesville (Illinois, USA).

Zaoberal sa termoelektrinou, tepelným žiarením, elektrónovou mikroskopiou a fyzikou kryštálov. V spolupráci s Lesterom Halbertom Germerom (1896–1971) pri pokusoch objavil v r. 1927 interferenciu elektrónových lúčov. Rozpracoval metódu fokusovania elektrónov. Spolu s G. P. Thomsonom dostal v r. 1937 Nobelovu cenu za objav ohybu elektrónových lúčov.

George Paget Thomson sa narodil 3. mája 1892 v Cambridgei. Bol synom J. J. Thomsona, objaviteľa elektrónov. Študoval v Cambridgei, v rokoch 1922–1930 bol profesorom v škótskom Aberdeene, potom pôsobil v Londýne a v Cambridgei. Nezávisle od amerických fyzikov Davissona a Germera dokázal v r. 1927 vlnové vlastnosti elektrónov. V r. 1937 mu udelili Nobelovu cenu za experimentálny dôkaz vlnových vlastností elektrónov štyridsať rokov po tom, čo jeho otec dostal Nobelovu cenu za objav korpuskulárnych vlastností elektrónov. Počas druhej svetovej vojny bol predstaviteľom britského výboru výskumu atómovej energie. Zomrel 10. septembra 1975.

Immanuel Estermann sa narodil 31. marca 1900 v Berlíne. Študoval v Hamburgu, kde aj pôsobil do r. 1933, kedy emigroval do USA. Pôsobil v Pittsburgu, Washingtone a napokon v Londýne. Spolu s Ottom Sternom odmeral magnetický moment deuterónu. Experimentoval s molekulovými lúčmi, zaoberal sa fyzikou tuhých telies, nízkych teplôt a supravodivosťou. Zomrel 3. marca 1973.

Otto Stern sa narodil 17. februára 1888 v Sorau, študoval vo Vratislavi, bol profesorom v Rostocku a v Hamburgu. V roku 1933 emigroval do USA, kde pôsobil v Pittsburgu. V roku 1920 experimentálne dokázal Maxwellovo rozdelenie molekúl podľa rýchlosti. V roku 1943 mu udelili Nobelovu cenu za fyziku za experimenty, ktorými dokázal rozdzvenie lúčov atómov striebra v nehomogénnom magnetickom poli (známy Sternov-Gerlachov pokus) a za odmeranie magnetického momentu protónu. V roku 1929 dokázal spolu s Estermannom vlnové vlastnosti protónov a atómov. Sternom určená hodnota magnetického momentu protónu je slávna aj iným spôsobom. Keď Stern začal s týmito pokusmi, spýtal

⁷⁶ Výnimku to tvorili práce W. R. Hamiltona (1805–1865), ktorý v rokoch 1824–1834 pri matematickom výskume rôznych problémov geometrickej optiky ukázal, že trajektóriu svetelného lúča prechádzajúceho nehomogénnym izotropným prostredím možno rovnako odvodiť tak na základe Fresnelových vlnových predstáv, ako aj z predstavy o častici pohybujúcej sa pod účinkom mechanických alebo iných síl. Hamiltonova analógia medzi optikou a dynamikou upadla po víťazstve vlnovej teórie svetla dočasne do zabudnutia a jej význam bol plne docenený až po prácach de Broglieho a najmä Schrödingera. ,

sa popredných fyzikov na to, aký výsledok čakávajú. Takmer všetci tvrdili, že protón bude mať hodnotu predpovedanú Diracovou rovnicou pre nabitú elementárnu časticu so spinom. Po čase priniesol Stern výsledok: ukázalo sa, že experimentálna hodnota bola 2,79-krát väčšia ako predpovede. A to bol aj prvý náznak toho, že protón nie je jednoduchou elementárnou časticou, ale zložitejším objektom. Dnes sa už vie o štruktúre protónu veľa.

Otto Stern zomrel 17. augusta 1969, a tak, ako to už u veľkých fyzikov býva, niečo z jeho výsledkov prispelo okamžite do formujúceho sa poznania a niečo (záhadná hodnota magnetického momentu protónu) ostalo na vysvetlenie nasledujúcej generácii.

5 KVANTOVÝ STAV ELEKTRÓNU AKO ČISTÝ HARMONICKÝ KMIT DE BROGLIEHO VLNY

5.1 ÚVOD

Aj keď sme sa v tejto knihe nesnažili sledovať históriu vzniku kvantovej mechaniky, dostali sme sa teraz zhruba tam, kde bola fyzika ku koncu r. 1924. Nemohli sme opísať všetky čiastočne úspešné alebo celkom neúspešné pokusy o pochopenie princípov stavby atómu, ktoré boli podstatné pre konečnú Heisenbergovu a Schrödingerovu formuláciu kvantovej mechaniky.

Kvantová mechanika vznikla dvoma nezávislými cestami: raz ako Heisenbergova „maticová“ mechanika a raz ako Schrödingerova „vlnová“ mechanika. Heisenbergova cesta je priamym pokračovaním a zavŕšením prác kodanskej skupiny. „Maticová“ mechanika vari lepšie vystihla všetko nové, čo priniesla teória atómov a mechanika mikrosвета v dvadsiatych rokoch. So zreteľom na jej nenázornosť sa s jej výsledkami stretávame v učebniciach kvantovej mechaniky pre pokročilejších. Opis strastiplnej genézy Heisenbergovej maticovej mechaniky je skutočne náročný.

Schrödingerova cesta, ktorej sa tu pridržame, nadviazala na de Broglieho hypotézu a kvôli jej pochopeniu nie je nevyhnutné vracat' sa až do histórie. Možno preto sa Schrödingerova cesta spravidla používa pri vyučovaní kvantovej mechaniky.

Z ďalších prác, ktoré tu podrobne nespomínáme, zohrali závažnú úlohu aj Einsteinove práce z rokov 1916 a 1917. Nachádzame v nich dôležité vzťahy medzi absorpciou a emisiou svetla atómami a, ako si ľudia uvedomili až neskôr, boli tu fakticky uvedené aj princípy, na ktorých pracujú dnešné lasery.

Predsa však kapitolu začneme stručným prehľadom niektorých základných poznatkov o štruktúre atómu a o vlastnostiach elektrónov a žiarenia, ktoré boli známe ku koncu r. 1924.

5.1.1 Prehľad situácie v atómovej fyzike ku koncu roku 1924

Medzi najzávažnejšie poznatky z oblasti atómovej fyziky patrili v tomto čase:

- objav kvantových vlastností žiarenia (Planckovo vysvetlenie žiarenia zahriatych telies z roku 1900 a Einsteinov výklad fotoelektrického javu z r. 1905),
- objav atómového jadra (Rutherford, Geiger a Marsden, 1911),
- Bohrovo vysvetlenie atómových spektier hypotézou o existencii diskretných kvantových stavov atómov (1913) a potvrdenie tejto hypotézy v experimentoch Francka a Hertza (1914),
- De Broglieho (v tom čase ešte nepotvrdená) hypotéza o vlnových vlastnostiach častíc (1923–1924).

Pre vznik novej teórie bolo, zdá sa, dôležité aj silnejúce presvedčenie o tom, že uvedené poznatky možno vysvetliť len pomocou *teórie založenej na nových princípoch*. Bez toho, že by sme sa držali histórie, ponúkame niekto argumentov na podporu takéhoto názoru. Už sme hovorili, že kvantovanie energie je cudzie klasickej fyzike, kde (kinetickú aj potenciálnu) energiu možno meniť spojite. Narastajúce experimentálne výsledky a nový pohľad na známe skutočnosti čoraz viac naznačovali, že kvantovanie energie atómov a žiarenia je fundamentálny poznatok, ktorý musí byť nevyhnutne zabudovaný priamo do základov teórie.

Bez kvantovania energie nemožno totiž pochopiť nielen dômyselne postavené experimenty, ale ani každodenné skúsenosti. Všetci vieme, že určitý čistý kov, napríklad železo, hliník alebo zlato sú úplne rovnaké bez prihliadania na to, kde sú vyrobené – jeden kúsok čistého železa má vždy rovnaké vlastnosti. To isté platí aj o ostatných látkach, napr. o čistej vode alebo čistej kuchynskej soli. Najprirodzenejším vysvetlením tejto skutočnosti je to, že atómy toho istého prvku sú vždy identické, a potom už možno pochopiť, že sú rovnako zostavené v danej látke. Pokiaľ by sme atómy chápali v Demokritovom zmysle,

mohli by sme si myslieť, že atómy železa majú istý tvar, atómy zlata dajaký iný tvar atď. Keď už vieme, že atómy sa skladajú z jadier a elektrónov, vysvetlenie musíme rozšíriť o poznanie, prečo sa 26 elektrónov v atóme železa usporiada vždy do toho istého stavu. V klasickej fyzike si niečo také ťažko možno predstaviť. V kvantovej fyzike je vysvetlenie prirodzené: sústava 26 elektrónov v atóme železa sa (za normálnych teplôt) usporiada tak, aby atóm bol v stave s najmenšou energiou. A so zreteľom na to, že existujú iba diskkrétne kvantové stavy, môžeme prirodzene očakávať, že takýto stav s najnižšou energiou je jediný – nazývame ho aj základným stavom atómu.

Identita atómov daného prvku (presnejšie izotopu) je, zdá sa, podstatná aj pre nás. Zložité organizmy sú zostavené z dosť malého počtu druhov atómov a pre činnosť organizmu je rozhodujúce práve usporiadanie atómov. Pri raste a vývoji si organizmus vyberá z okolia atómy daného typu a ukladá ich do komplikovanej schémy. Táto úloha je určite jednoduchšia, ak sú atómy daného typu identické („štandardizované tehličky“) než pri neidentických atómoch.

S *identitou atómov* a s existenciou základného stavu tesne súvisí aj otázka *stability atómu*. Už sme hovorili o tom, že planetárny model atómu riadiaci sa základnými pravidlami klasickej fyziky by musel vyžarovať energiu a elektrón by musel padnúť skoro na jadro. Ak existuje istý stav atómu, ktorý má najmenšiu možnú energiu, potom atóm v tomto stave už nemôže vyžarovať. Pri vyžarovaní by totiž musel strácať energiu a prechádzať zo stavu s danou energiou do stavu s nižšou energiou. A ak je raz atóm v základnom stave, potom stavov s nižšou energiou jednoducho niet a atóm nebude vyžarovať.

Ďalšou vlastnosťou látok, známou z každodennej skúsenosti a ťažko vysvetliteľnou bez kvantovej fyziky, je *schopnosť regenerácie atómov*. Stručné vysvetlenie je nasledujúce. Majme *voľný* atóm v základnom stave a zmeňme dramaticky podmienky, v ktorých sa tento atóm nachádza (napríklad tým, že ho zavedieme do molekuly alebo takej látky, kde väzby so susednými atómami zmenia stav elektrónov). Atóm sa takto skutočne zmení. Ak ho ale dáme neskôr do pôvodných podmienok, atóm sa „regeneruje“ – bude opäť v pôvodnom stave a bude mať všetky pôvodné vlastnosti. Uvedme teraz konkrétnejší príklad. Prítomnosť pár sodíka vo výbojke poznáme podľa charakteristickej žltej farby (vlnová dĺžka tohto žltého svetla je $\lambda \approx 589$ nm). Ak z pár sodíka zvýšením tlaku alebo znížením teploty urobíme kovový sodík, typické žlté svetlo sa stratí a budeme mať typický lesklý kúsok kovu. Zmena je prirodzená. Tým, že z atómov vznikol kov, museli sa elektróny v atómoch usporiadať dajako ináč a zmena vlastností naznačuje len to, že svetlo vysielané alebo pohlcované atómom podstatne súvisí s usporiadaním jeho elektrónov. Zaujímavé je, že po zahriatí a vyparení kovu vzniknú zas pary sodíka, ktoré budú zas vyžarovať to isté žlté svetlo s tou istou vlnovou dĺžkou. Možno to prirodzene vysvetliť len tak, že po vyparení kovového sodíka sa atómy regenerujú, t. j. dostanú sa opäť do toho istého stavu, ako boli predtým a opäť budú rovnako interagovať so žiarením⁷⁷.

Bez existencie kvantových stavov je takáto regenerácia atómov úplne nemysliteľná.

Ďalší príklad, ktorý sa dá prirodzene vysvetliť pomocou kvantových stavov (ťažko inak) je pravidelné usporiadanie kryštálov. Už Kepler si počas svojho pražského pobytu ako dvorný matematik cisára Rudolfa II. začiatkom 17. storočia všimol pravidelný a vždy rovnaký základný tvar snehových vločiek a zamýšľal sa nad príčinou tohto javu. Jednoduchým kvalitatívnym vysvetlením je, že molekuly vody, z ktorých sa napokon skladá ľad, majú istý základný tvar, ktorý si v podstate podržia pri vzniku ľadu. Tento tvar teda určuje aj ich usporiadanie v snehových kryštálikoch.

Opísaný „základný tvar“ molekúl vody možno ťažko vysvetliť inak ako existenciou kvantových stavov molekúl.

Z odborných prác fyzikov zaoberajúcich sa najmä interakciou žiarenia s atómami jasne vidno, že pojem diskrétného a presne definovaného kvantového stavu sa čoraz častejšie stával základným pojmom atómovej fyziky a postupne narastalo presvedčenie o tom, že v novej teórii musí byť taký fundamentálny pojem, akým je kvantový stav, odvodený zo základných princípov. Heisenberg vo svojej autobiografii (*Des Teil und das Ganze*, München, Piper und Co., 1969) uvádza, že o týchto otázkach sa v r. 1924 veľa diskutovalo v Göttingene aj v Kodani.

⁷⁷ Príklad aj niektoré argumenty pred ním sú z knihy V. F. Weisskopfa: *Poznání a údiv – svět přírody očima člověka*, vydal roku 1967 Orbis Praha, z anglického originálu preložil Jan Fischer. Zdá sa, len tak mimochodom, že táto pekná, hlboká a ľahko čitateľná Weisskopfova kniha podstatne ovplyvnila súčasné snahy o integrovanú výučbu prírodných vied na stredných školách. Bolo by dobre, keby vyšla u nás v ďalšom vydaní vo veľkom náklade. Čitateľom ju veľmi odporúčame.

5.1.2 „Podivné fakty“ si niekedy nevyhnutne vyžadujú „podivnú teóriu“

Pri štúdiu klasickej Newtonovej mechaniky sa zdá, že je všetko v poriadku. Dôležité pojmy ako sila, dráha, rýchlosť, zrýchlenie sa javia prirodzené (aj keď pojem okamžitej rýchlosti nie je ten najľahší) a vzťahy medzi nimi sú tiež prirodzené: väčšia sila udelí danej hmotnosti väčšie zrýchlenie a pod.

Pri iných teóriách je situácia iná. Podľa špeciálnej teórie relativity⁷⁸ nameria pozorovateľ na Zemi pre letiacu raketu menšiu dĺžku, ako je dĺžka rovnakej rakety stojacej vedľa pozorovateľa; letiaci kozmonaut starne o čosi pomalšie ako jeho dvojča, ktoré ostalo na Zemi a vôbec sa dejú podivné veci. Teória sa zdá byť krásne mystická a „proti zdravému rozumu“. Pochopiť ju možno len vtedy, ak si uvedomíme, že „proti zdravému rozumu“ jestvuje experiment, z ktorého teória vychádzala.

V prípade špeciálnej teórie relativity je to princíp konštantnej rýchlosti svetla, ktorý plne potvrdil experiment. Ak sa nad tým trocha zamyslíme, uvidíme, že „zdravému rozumu“ sa prieči, keď svetlo vyslané zo stojacej baterky sa pohybuje voči nám rovnakou rýchlosťou ako svetlo vyslané z baterky pripevnenej na rýchlo letiacom lietadle. A túto rýchlosť nezmeníme ani vtedy, keď zariadenie na meranie rýchlosti svetla pripevníme na druhé lietadlo a budeme letieť s ním smerom k (alebo proti) lietadlu, na ktorom je pripevnená spomínaná baterka.

Tento „podivný“ fakt, ako ukázal Einstein, vedie k relatívnosti súčasnosti, k skracovaniu dĺžok letiacich tyčí a k všetkým „podivným“ výrokom špeciálnej teórie relativity. Poznamenajme ešte, že fakt je fakt, a to, či je „podivný“ alebo „proti zdravému rozumu“, je psychologická otázka. „Podivnosť“ takéhoto faktu pochádza z toho, že je iný ako fakty, na ktoré sme si v našej každodennej skúsenosti už zvykli. Fyzika rýchlostí porovnateľných s rýchlosťou svetla nepatrí do našej každodennej skúsenosti a nemôžeme sa preto čudovať, že v nej platia iné zákonitosti.

Predsa však je prirodzené, že ľudia si len veľmi ťažko privykali na nové zákonitosti špeciálnej teórie relativity a mnohí ju aj dosť dlho odmietali.

S podobnou situáciou sme sa ale už stretli na konci prvej kapitoly, keď sme hovorili o významných postavách gréckej filozofie. Zenón si nevedel „prirodzene“ rozumovo vysvetliť pohyb, a preto ho popieral. Takisto človek naučený rozmýšľať v kategóriách Newtonovej fyziky si nevie rozumovo vysvetliť, že čas plynie v sústave, ktorá sa voči nemu pohybuje inak ako v „jeho“ sústave. Ale princíp konštantnej rýchlosti svetla, plne potvrdený experimentom, nás logicky privedie k prijatiu relatívnosti súčasnosti a k všetkým spomínaným „čudám“ špeciálnej teórie relativity.

So zákonitosťami vo svete atómov je to podobné. Existenciu kvantových stavov treba chápať ako experimentálny fakt, ktorý logicky nevyplýva z klasickej fyziky⁷⁹. Nemôžeme sa preto čudovať, že teória, ktorá tento fakt jednoducho a prirodzene vysvetľuje, je „podivná“ z hľadiska klasickej fyziky. To, že nová teória zákonitostí vo svete atómov bude „podivnou“, začali fyzici tušiť už skoro po Bohrovom vysvetlení vzniku spektrálnych čiar pomocou kvantových stavov. Vidno to už z nasledujúcej príhody. Keď Bohr poslal svoju prácu Rutherfordovi, skoro dostal odpoveď, v ktorej Rutherford upozorňoval na jednu „podivnú“ vlastnosť Bohrovho modelu. Podstata jeho argumentu bola nasledujúca. V spektre atómu vodíka sa objavuje čiara zodpovedajúca, povedzme, prechodu z kvantového stavu „3“ do stavu „2“ aj čiara prechodu zo stavu „3“ do stavu „1“ (prítom „1“, „2“, „3“ označujú kvantové stavy s energiami E_1 , E_2 , E_3 a predpokladáme, že označenie je vybrané tak, aby bolo $E_3 > E_2 > E_1$). Elektrón zo stavu „3“ teda niekedy preskočí do stavu „2“ a niekedy do stavu „1“. Ak je ale elektrón v stave „3“, odkiaľ vie, do akých stavov môže preskočiť? A ako vie, kedy má skočiť do stavu „2“ a kedy do stavu „1“?

Tieto otázky sa neskôr vynárali mnohokrát v rozličných formuláciách. Podstatné v nich je, že pri klasickej opise pohybu elektrónu by teória musela vyzeráť inak. Keby sa elektrón pohyboval po určitej trajektórii, potom pri prechode zo stavu „3“ do stavu „2“ by muselo vyžarované svetlo závisieť nielen od samotných stavov „3“ a „2“, ale aj od trajektórie, po ktorej sa elektrón pohyboval a navyše by elektrón zo stavu „3“ sotva mohol skočiť raz do stavu „2“ a raz rovno do stavu „1“, ale musel by sa hýbať určitým a vždy rovnakým spôsobom. Napríklad, najprv by skočil zo stavu „3“ do stavu „2“ a potom zo stavu „2“ do stavu „1“. Potom by sa ale v spektre objavili fotóny s energiami $(E_3 - E_2)$ a $(E_2 - E_1)$, ale

⁷⁸ Ak čitateľ nerozumie niečomu v nasledujúcom článku, pretože sa ešte nezoznámil so špeciálnou teóriou relativity, môže ho jednoducho vynechať.

⁷⁹ K tomuto presvedčeniu fyzici prišli po neúspešných pokusoch o zabudovanie kvantovania energie či jeho prejavov do schémy klasickej fyziky.

nevideli by sme fotón s energiou ($E_3 - E_1$). Experiment však ukazuje, že v spektre atómu vodíka také fotóny sú.

Z príkladu vidno, že „podivný“ fakt existencie kvantových stavov si bude vyžadovať skutočne „podivnú“ teóriu, ktorá sa nevyhnutne musí podstatne odlišovať od klasickej fyziky.

Z predchádzajúcej diskusie vidno, a fyzici to začiatkom dvadsiatych rokov cítili, že kvantová mechanika nemala byť teóriou len pre niekoľko málo javov, ale novou univerzálnou teóriou. Mala vysvetliť a poskytnúť postup na výpočet diskretných kvantových stavov atómov, mala viesť ku kvantovým vlastnostiam elektromagnetického poľa, vysvetliť štruktúru molekúl (a tým aj chemickú väzbu), štruktúru tuhých látok, absorpciu a emisiu žiarenia a viacero ďalších javov. A všetko toto kvantová mechanika skutočne dala v krátkom období piatich rokov 1925–1930.

Zdá sa dokonca, že situácie pri vzniku novej veľkej teórie majú niektoré črty spoločné. Jednou z nich je syntéza či zlúčenie alebo jednotný pohľad na viacero zdanlivo nesúvisiacich vecí.

Newtonov gravitačný zákon zjednotil pohyby obyčajných pozemských telies ako napr. padajúceho kameňa s pohybmi „nebeských“ telies – Mesiaca a planét. Maxwellova elektrodynamika zjednotila nielen elektrické a magnetické javy, ale aj zákony šírenia sa svetla.

A vždy po vzniku nových teórií sa podarilo skoro vysvetliť veľké množstvo nových javov.

Pri kvantovej mechanike to nebolo inak. Nová teória zjednotila do jediného celku kvantové vlastnosti atómov aj žiarenia, ich vzájomné pôsobenie i štruktúru atómov a veľmi skoro po svojom vzniku poskytla nečakané množstvo nových výsledkov.

5.2 DISKRÉTNY KVANTOVÝ STAV AKO ČISTÝ HARMONICKÝ KMIT DE BROGLIEHO VLNY

Schrödinger veril, že de Broglieho hypotéza je správna (ešte pred jej experimentálnym potvrdením) a že elektrón je skutočne vlnou. Vedel tiež, že elektrón v atóme vodíka a v mnohých iných situáciách vytvára isté diskretné kvantové stavy, ktoré majú presne definované energie. Ak tieto dva poznatky mali zapadnúť do jednotného celku, tak potom museli kvantové stavy s diskretnými a presne definovanými hodnotami energie predstavovať isté špeciálne typy vlnenia. Vzniká teda základná otázka: aký typ vlnového procesu zodpovedá kvantovému stavu s určitou hodnotou energie. Aby sme na ňu mohli odpovedať, pripomeňme si, čo je pre kvantové stavy typické a všimnime si možné súvislosti týchto typických vlastností kvantových stavov s vlnovými procesmi.

– Charakter daného kvantového stavu sa s časom nemení – *stav je stacionárny*. Pokúsime sa to vysvetliť trochu podrobnejšie. Ak máme atóm vodíka v istom stave, potom sa tento stav podstatne zmení pri „preskoku“ atómu do iného stavu za súčasnej absorpcie alebo emisie fotónu. Pokiaľ ale atóm do iného kvantového stavu nepreskočí a ostáva v danom stave, tak sa charakter stavu nemení. Atóm vodíka v základnom stave vyrobený elektrolyzou vody pred týždňom je rovnaký ako atóm vodíka vyrobený hoci aj iným spôsobom včera. Základný stav „staršieho“ atómu sa za týždeň nijak nezmenil.

– Diskretný kvantový stav má určitú hodnotu energie. Z Planckovho-Einsteinovho vzťahu pre energiu fotónu $E = \hbar\omega$ vieme, že pre rovinnú elektromagnetickú vlnu energia súvisí veľmi úzko s frekvenciou. Ak predpokladáme, že takáto súvislosť platí aj v iných situáciách, potom očakávame, že stavu s určitou energiou musí zodpovedať vlnový proces, ktorý má určitú, presne zadanú frekvenciu.

Ak predchádzajúce argumenty zhrnieme, zistíme, že kvantovému stavu elektrónu s určitou hodnotou energie musí zodpovedať vlnový proces, ktorý je:

1. stacionárny (t. j. jeho charakter sa s časom nemení),
2. má istú presne danú frekvenciu.

Teraz je už ľahko uhádnuť riešenie problému. Vlnové procesy s vlastnosťami 1., 2. skutočne jestvujú a už sme sa s nimi stretli v 2. článku 4. kapitoly. Sú to čisté harmonické kmity, ktoré nazývame tiež stojatými vlnami. V citovanom mieste sme si ukázali, že kmity klasickej struny dĺžky L pripevnenej na oboch koncoch možno vyjadriť vzťahom

$$u_n(x, t) = C \sin(k_n x) \cos(\omega_n t) \quad (1)$$

kde $u_n(x, t)$ vyjadruje výchylku struny z rovnovážnej polohy v mieste x , v čase t , pri n -tom harmonickom kmite, C je konštanta, k_n je vlnový vektor viazaný s dĺžkou vlny vzťahmi

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n}, \quad \lambda_n = \frac{2\pi}{n}$$

kde $n = 1, 2, 3, \dots$, podľa toho, ktorý harmonický kmit máme. Napokon ω_n je uhlová frekvencia daného kmitu. Vzťah (1) ukazuje, že harmonický kmit je skutočne stacionárny, charakter kmitu je stále rovnaký. Na obr. 4.5 sú naznačené postupné polohy struny pri základnom tóne. Ak odstránime trenie struny o kolíky, na ktorých je pripevnená, a ak celú strunu dáme do nádoby, z ktorej vyčerpáme vzduch, bude struna, ktorá kmitá podľa základného harmonického kmitu, kmitať stále rovnako: „hore“, „dolu“, „hore“, „dolu“,...

Charakter jej pohybu sa skutočne s časom nemení, harmonický kmit je stacionárny⁸⁰.

Aj druhá požiadavka na vlnové analógie kvantových stavov s určitou hodnotou energie je splnená. Čistý harmonický kmit má presne zadanú frekvenciu pohybu. Vidno to okamžite z rovnice (1) kde faktor $\cos(\omega_n t)$ udáva časovú závislosť. Hudobníci to, prirodzene, dobre vedia – struna kmitajúca v danom harmonickom kmite vydáva čistý tón a čistý tón je spojený s jedinou frekvenciou.

Vidno teda, že čisté harmonické kmity majú práve tie dve podstatné vlastnosti kvantových stavov, ktoré sme už spomínali.

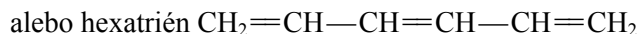
Vedený takýmto a podobnými úvahami Schrödinger prišiel k mimoriadne závažnej myšlienke:

Kvantové stavy elektrónu v atóme sú čistými harmonickými kmitmi (stojatými vlnami) de Broglieho elektrónových vln.

Vychádzajúc z tejto myšlienky odvodil rovnicu, ktorá opisuje kmity de Broglieho vlny prislúchajúcej elektrónu, ktorý sa nachádza v prítlačlivom poli protónu a našiel uhlové frekvencie ω_n čistých harmonických kmítov. Takéto harmonické kmity interpretoval ako kvantové stavy elektrónu v atóme vodíka a energie kvantových stavov vyjadril ako $E_n = \hbar\omega_n$. Ukázalo sa, že hodnoty E_n sa presne rovnajú skutočným hodnotám energií kvantových stavov atómu vodíka. Samotná Schrödingerova rovnica aj metódy jej riešenia si vyžaduje dosť náročný matematický aparát, a preto si o nej povieme niečo až ku koncu knihy. Aby sme ale videli mechanizmus, ktorý vedie ku kvantovaniu energetických hladín elektrónu, všimnime si v nasledujúcom článku jednoduchý príklad, ktorý budeme vedieť vyriešiť, či skôr uhádnuť jeho riešenie aj bez zložitého matematického aparátu.

5.3 ELEKTRÓN VIAZANÝ NA ÚSEČKU

Predstavme si elektrón, ktorý sa môže pohybovať iba v jednom smere – pozdĺž osi x a navyše je viazaný na úsečku $0 \leq x \leq L$. Príklad nie je celkom realistický, ale niečo podobné sa v prírode predsa len vyskytuje. V dlhých organických molekulách, ako sú



sa niektoré elektróny môžu viac-menej voľne pohybovať pozdĺž molekuly⁸¹. V istom priblížení ich možno považovať za voľné elektróny viazané na úsečku s dĺžkou L , ktorá sa rovná dĺžke molekuly. V ďalšom sa budeme zaujímať iba o túto zjednodušenú situáciu.

Potrebuje teda uhádnuť tvar stojatých de Broglieho vln pre elektrón, ktorý je viazaný na úsečku dĺžky L . Keby sme poznali Schrödingerovu rovnicu, nemuseli by sme hádať, všetko by nám presne vyšlo. Ale aj vtedy by bolo dobre rozumieť výsledku jednoduchým a názorným spôsobom.

Tvar stojatých de Broglieho vln pre elektrón viazaný na úsečku uhádneme pomocou analógie s kmitmi klasickej struny s dĺžkou L . Ako sme videli v predchádzajúcej kapitole, pri maximálnej výchylke je

⁸⁰ Samozrejme, nie všetky kmity struny sú stacionárne. Keby sme napríklad strunu v istom čase natiahli pomocou špendlíkov do veľmi nepravidelného tvaru a potom ju naraz uvoľnili, nezval by sa čistý tón, ale akýsi „šrek“. Pri takomto pohybe by sa tvar struny menil s časom celkom nepravidelne a pohyb by nebol „stacionárny“.

⁸¹ Každá dvojité väzba sa skladá z dvoch párov elektrónov. Jeden z nich je viazaný silno a lokalizovaný na danom mieste molekuly. Druhý pár je viazaný slabšie a práve tieto elektróny môžu putovať po molekule. Priznajme ešte, že molekuly v (3) nemajú tvar jedinej úsečky, ale skladajú sa skôr z niekoľkých úsečiek zvierajúcich uhol 120° (každá väzba odpovedá jednej takejto úsečke). Ak nám stačia približné výsledky, potom môžeme molekulu považovať za jedinú „priamu“ úsečku a elektrón za voľný.

tvár takýchto klasických stojatých vln

$$u_n(x) = A \sin\left(2\pi \frac{x}{\lambda_n}\right), \quad \lambda_n = \frac{2L}{n} \quad (4)$$

kde n je celé číslo $n = 1, 2, 3, \dots$, podľa toho, ktorý čistý harmonický tón sme na strune vybudili. Predpokladáme teda, že stojaté de Broglieho vlny budú mať tiež tvar (4).

Ostáva nám ešte uhádnuť ich energiu. Vieme, že pre postupnú rovinnú vlnu, ktorá prislúcha elektrónu s istou hybnosťou p platí

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (5a)$$

Preto platí aj

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \quad (5b)$$

Energiu voľného elektrónu s hybnosťou p môžeme ale písať v tvare

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2m}(mv)^2 = \frac{1}{2m}p^2 \quad (6)$$

Ak p vyjadríme podľa (5b), dostaneme

$$E = \frac{1}{2m}\left(\frac{2\pi\hbar}{\lambda}\right)^2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{m\lambda^2} \quad (7)$$

Tento vzťah vyjadruje kinetickú energiu voľného elektrónu. Ak sa pozrieme na obrázky 4.5, 4.6 a 4.7, zdá sa nám prirodzené hovoriť aj pri stojatých vlnách o istej dĺžke vlny, a budeme to v ďalšom aj robiť⁸².

Predpokladajme teraz, bez hlbšieho odôvodnenia, že aj pre stojaté de Broglieho vlny platí vzťah (7), ktorý viaže energiu harmonického kmitu s príslušnou vlnovou dĺžkou. Takto dostávame pre n -tý harmonický kmit z rovníc⁸³ (7) a (4).

$$E_n = \frac{2\pi^2\hbar^2}{m\lambda_n^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \cdot n^2 \quad (8)$$

kde $n = 1, 2, 3, \dots$

Základný kvantový stav (s najnižšou energiou) odpovedá harmonickému kmitu s $n = 1$. Pri ňom je $L = \lambda_1/2$, t. j. „polvlna na celú oblasť“. Energia základného stavu je

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad (9)$$

Ako vidíme z (8), energie kvantových stavov priradených čistým harmonickým kmitom de Broglieho vlny sú skutočne kvantované. Náš príklad bol natoľko jednoduchý, že mechanizmus kvantovania vidno jasne. Podľa vzťahu (4) môže pri stojatých kmitoch nadobúdať vlnová dĺžka len určité diskkrétne hodnoty. Podľa argumentov zhrnutých v rovniciach (6) a (7) odpovedá určitej vlnovej dĺžke určitá hodnota energie a ak vlnová dĺžka nadobúda iba diskkrétne hodnoty, potom aj energia môže nadobúdať len isté diskkrétne hodnoty.

Všimnime si ešte jeden dôležitý aspekt predchádzajúceho výsledku. Podľa klasického vzťahu pre kinetickú energiu častice (6) platí $E = p^2/(2m)$. Tento vzťah ostáva v platnosti aj v kvantovej mechanike

⁸² Nie je to celom korektné, lebo o presnej hodnote dĺžky vlny môžeme celkom jednoznačne hovoriť len pri postupnej rovinnej vlne. Pozri poznámku pod čiarou č. 64.

⁸³ Podrobný výpočet riešením Schrödingerovej rovnice v kvantovej mechanike vedie tiež ku vzťahu (8), takže hodnoty energie, ktoré sme iba „uhádli“, sú zhodou okolností celkom presné. Naproti tomu kvantová mechanika „odoberuje“ vzhľadom na prvú poznámku vzťahu (5) len pre voľnú časticu.

a vidíme z neho, že p^2 môže tiež nadobúdať (v našom jednoduchom prípade) len diskkrétne hodnoty. S využitím (7) máme

$$(p^2)_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{L^2} n^2 \quad (11)$$

Symbol na ľavej strane označuje hodnotu p^2 v n -tom kvantovom stave. Fyzikálny dôvod je v tom, že p^2 je de Broglieho vzťahom $p = 2\pi\hbar/\lambda$ viazané s vlnovou dĺžkou a vlnové dĺžky stojatých vln môžu nadobúdať len diskkrétne hodnoty. Pre základný stav máme

$$(p^2)_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{L^2} \quad (12)$$

Na tento vzťah sa možno pozrieť aj z hľadiska rozmerovej analýzy. Ak máme elektrón s hmotnosťou m viazaný na úsečku dĺžky L , potom typická hybnosť tohto elektrónu v základnom stave môže závisieť iba od m , L a Planckovej konštanty \hbar . Podobne, ako sme postupovali v 3. kapitole, aj teraz napíšeme

$$p^2 \sim \hbar^\alpha L^\beta m^\gamma$$

a po dosadení rozmerov (L – dĺžka, M – hmotnosť, T – čas) máme

$$(MLT^{-1})^2 = (ML^2T^{-1})^\alpha L^\beta M^\gamma$$

Porovnaním mocniteľov pri M , L , T rýchlo nájdeme $\alpha = 2$, $\beta = -2$, $\gamma = 0$, a preto

$$p^2 \approx \frac{\hbar^2}{L^2} \quad (12)$$

Vzťah (12) ukazuje⁸⁴, že typická hodnota p^2 v základnom stave je úmerná $1/L^2$, kde L je rozmer oblasti, v ktorej sa stojatá vlna nachádza. Význam tohto faktu pre stabilitu atomárnych sústav uvidíme v nasledujúcom článku.

5.4 PODIVNÁ VLASTNOSŤ ELEKTRÓNOVEJ VLNY – ODPOR PROTI STLÁČANIU. PRÍČINA STABILITY ATÓMOV

V tomto článku budeme počítat' tlak elektrónu na steny ohraničujúce oblasť, v ktorej sa elektrón nachádza. Objasníme ale najprv princíp úvahy na prípade, ktorý poznáme lepšie – na stláčaní plynu. Predstavme si plyn izolovaný od okolia (nijaká výmena tepla) v trubici. Ak na piest pôsobíme silou F a posunieme ho o dĺžku ΔL , vykonáme prácu $F\Delta L$. Za uvedených podmienok musí táto práca zvýšiť (vnútornú) energiu plynu, teda

$$E' - E = \Delta L$$

kde E je energia plynu pred stlačením, E' je energia po stlačení. Takto zo známej vonkajšej sily určujeme prírastok energie pri danom posunutí. Úvaha sa ale dá aj obrátiť. Predpokladajme, že poznáme energiu plynu pred stlačením aj po ňom a poznáme dĺžku posunutia piesta. Potom môžeme podľa vzťahu

$$F = \frac{E' - E}{\Delta L}$$

určiť silu, ktorou plyn pôsobí na piest. V podstate túto úlohu budeme používať v ďalšom.

Predstavme si pre lepšiu názornosť a napriek tomu, že to nie je realistické, elektrón viazaný na jednorozmerovú úsečku tak, ako to vidno na obr. 5.1. Stojatá vlna prislúchajúca základnému stavu vzniká medzi piestmi P_1 a P_2 v dlhej tenkej trubici T . Ak piest P_2 posunieme pomaly doprava, elektrón bude

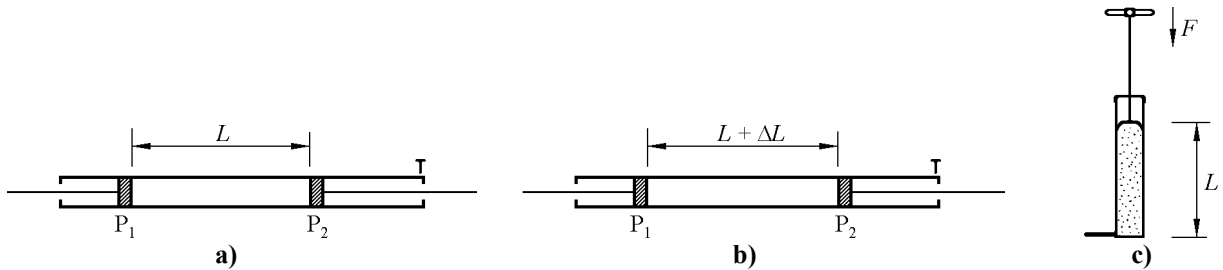
⁸⁴ Po skúsenostiach, ktoré už s rozmerovou analýzou z 3. kapitoly máme, nás neprekvapuje, že presný vzťah (11) platný v špeciálnom prípade elektrónu na úsečke sa od vzťahu (12) získaného rozmerovou analýzou odlišuje číselným faktorom π^2 .

opäť v základnom stave, ale príslušná oblasť, ktorú zaberá, bude väčšia a jeho dĺžka vlny narastie. Podľa (9) bude energia základného stavu v prípade znázornenom na obr. 5.1a daná vzťahom

$$E_1(L) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (13a)$$

a po zväčšení „úsečky“ medzi piestmi o ΔL budeme mať

$$E_1(L + \Delta L) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(L + \Delta L)^2} \quad (13b)$$



Obr. 5.1 a) Naivné znázornenie situácie pri elektróne viazanom na úsečku. T označuje dlhú tenkú trubicu, P_1 , P_2 sú dva piesty a v oblasti medzi nimi je elektrón v základnom kvantovom stave zodpovedajúcom de Broglieho stojatej vlny s polvlnou $\lambda/2$ rovnou dĺžke oblasti medzi piestmi, **b)** dostaneme posunutím piesta P_2 o ΔL doprava. **c)** Stláčanie plynu v bicyklovej pumpe s uzavretým otvorom pre hadičku. Stláčanie sa zastaví, keď sa vonkajšia sila pôsobiaca na rúčku vyrovná so silou, ktorou pôsobí plyn na piest

Pretože ΔL je kladné, bude v druhom prípade energia menšia. Znamená to, že pri zväčšení úsečky, na ktorej je vytvorená stojatá vlna, sa znižuje energia elektrónu a táto energia sa spotrebuje na roztláčanie piestov. Na piest P_2 teda pôsobí sila F a platí pre ňu

$$E_1(L) - E_1(L + \Delta L) = F\Delta L \quad (14)$$

Ak sem dosadíme z (13a), (13b), dostaneme po jednoduchej úprave

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \cdot \frac{2L\Delta L + (\Delta L)^2}{(L + \Delta L)^2 L^2} = F\Delta L$$

Predelíme teraz celú rovnicu prírastkom dĺžky ΔL a potom v čitateli i v menovateli zanedbáme ΔL proti L . Predpokladáme totiž, že $\Delta L/L \ll 1$. Takto pre silu dostaneme

$$F = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m} \frac{1}{L^3} \quad (15)$$

Vidíme teda, že elektrónová vlna sa bráni stláčaniu a pôsobí na steny „nádoby“ ohraničujúcej oblasti, v ktorej sa elektrón môže pohybovať istou silou. Túto vlastnosť už vlastne vidno aj z rovnice (13a). Energia základného stavu elektrónu viazaného na úsečku dĺžky L rastie s klesajúcim L . Pri stláčaní elektrónovej vlny teda musíme tejto vlny dodávať energiu a musíme vonkajšími silami pracovať proti tlaku vlny. Fyzika za týmto javom je jednoduchá. Ak je elektrón v základnom kvantovom stave, potom dĺžka stojatej de Broglieho vlny je približne rovná dvojnásobku oblasti, v ktorej sa elektrón môže nachádzať $\lambda_1 \approx 2L$. Ak dĺžku oblasti znižujeme, skrácujeme tým dĺžku vlny, príslušná hodnota štvorca hybnosti (p^2)₁ rastie a rastie aj kinetická energia elektrónu. Tento mechanizmus je tiež príčinou stability atómov. Ak máme, povedzme v atóme vodíka, elektrón v základnom stave, potom naň pôsobí príťažlivá sila jadra atómu (t. j. protónu). Táto sila sa snaží pritiahnúť elektrón do jadra. S elektrónom je ale spojená stojatá de Broglieho vlna a na zmenšenie oblasti, v ktorej sa vlna nachádza, treba konať prácu. So zmenšovaním oblasti zaujatej vlnou, rastie podľa vzťahu analogického k (13a) kinetická energia elektrónu. Sťahovanie vlny (zmenšovanie jej rozmerov) sa zastaví vtedy, keď príťažlivé coulombovské sily nestačia prekonať tlak elektrónovej vlny. Vtedy má vlna minimálnu celkovú energiu rovnú súčtu kinetickej a potenciálnej energie a takáto situácia práve zodpovedá základnému stavu atómu.

Jednoducho by sme tento mechanizmus videli v „práci“ na príklade nášho elektrónu v trubici medzi piestmi. Predstavme si, že L na obr. 5.1a je veľmi veľké a piesty stláčame silou f . Pri veľkom L bude tlak elektrónovej vlny daný rovnicou (15) malý a pokiaľ platí $f > F$, stláčanie bude pokračovať. Pri istom L sa ale konštantná vonkajšia sila f vyrovná so silou F , ktorou elektrónová vlna roztláča piesty a stláčanie sa zastaví. Analógiou tohto stláčania elektrónu je stláčanie plynu v bicyklovej pumpe pri uzavretej hadičke. Ak na rukoväť pôsobíme istou silou f (obr. 5.1 c), stláčame stĺpec plynu. Sila, ktorou pôsobí plyn na piest, je daná stavovou rovnicou (v obvyklom označení)

$$pV = nRT$$

Ak zapíšeme $V = S \cdot L$, kde S je prierez piesta a L výška stĺpca plynu, máme

$$F' = pS = \frac{nRT}{L}$$

Pritom F' je sila, ktorou plyn pôsobí na piest. Ak je vonkajšia sila konštantná, L sa znižuje po hodnote, pri ktorej sa vonkajšia sila a sila, ktorou pôsobí plyn na piest, vyrovnajú.

Poznamenajme ešte, že sila v (15) súvisí aj s reálnymi fyzikálnymi veličinami, menovite so stlačiteľnosťou tuhých telies alebo kvapalín. Podrobnosti tu nebudeme uvádzať.

5.5 ENERGIA A ROZMER STOJATEJ VLNY PRE ZÁKLADNÝ STAV LINEÁRNEHO HARMONICKÉHO OSCILÁTORA

Lineárny harmonický oscilátor (ďalej budeme hovoriť už len stručne oscilátor) je veľmi jednoduchá mechanická sústava, ktorá je užitočná pri opise mnohých fyzikálnych situácií, a to od kmitov mechanických sústav po kvantovú teóriu polí. Najjednoduchším príkladom oscilátora je teliesko s hmotnosťou m pripevnené na pružinke s tuhosťou k . Ak teliesko vychýlime z rovnovážnej polohy o vzdialenosť x , bude naň pôsobiť sila $F = -kx$. Záporné znamienko na pravej strane hovorí, že sila má opačný smer ako výchylka a snaží sa teliesko vrátiť do rovnovážnej polohy. Ak pre takéto teliesko napíšeme druhý Newtonov zákon, máme

$$ma = -kx \quad (16)$$

kde a je zrýchlenie telieska. Tento vzťah často prepisujeme ako

$$a = -\omega^2 x, \quad \omega^2 = \frac{k}{m} \quad (17)$$

Lahko sa presvedčíme o tom, že ω má rozmer s^{-1} . Zo (16) vidno, že

$$[k] = \frac{\text{sila}}{\text{dĺžka}} = \frac{MLT^{-2}}{L} = MT^{-2}$$

a preto rozmer veličiny $\omega^2 = k/m$ bude T^{-2} . Z gymnaziálnej fyziky vieme, že riešením pohybovej rovnice (17) sú kmity telieska okolo rovnovážnej polohy s uhlovou frekvenciou ω :

$$x(t) = A \cos(\omega t + \varphi) \quad (18)$$

kde A je amplitúda kmitov, φ fáza daná začiatočnými podmienkami. Ešte budeme potrebovať vyjadrenie pre energiu oscilátora. Táto sa skladá z kinetickej energie, ktorá je daná obvyklým výrazom

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

a z potenciálnej energie E_p . Veličina E_p je rovná práci, ktorú musíme vykonať pri vychýlení telieska z rovnovážnej polohy pri $x = 0$ do polohy pri určitom x . Túto prácu konáme proti silám pružiny. Pri takomto vychýľovaní sila, ktorou musíme pôsobiť na teliesko, rastie zo začiatočnej nulovej hodnoty

na hodnotu kx pri plnej výchylke. Využili sme tu tretí Newtonov zákon. Ak je $-kx$ sila, ktorou pôsobí pružina na teliesko, tak $+kx$ je sila, ktorou teliesko ťahuje pružinu. Vzhľadom na to, sila rastie lineárne s výchylkou, môžeme jednoducho dostať priemernú silu, ktorou pôsobíme na teliesko

$$F_{\text{priem}} = \frac{0 + kx}{2} = \frac{1}{2}kx$$

Celková práca, ktorú potrebujeme na vychýlenie telieska do danej polohy, potom bude

$$E_p = F_{\text{priem}} \cdot x = \frac{1}{2}kx^2$$

Podľa (17) ešte môžeme zapísať k v tvare $k = m\omega^2$ a pre potenciálnu energiu máme

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (19)$$

Celkovú energiu telieska dostaneme ako súčet kinetickej a potenciálnej energie

$$E = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (20)$$

Teraz sa budeme zaoberať základným stavom lineárneho harmonického oscilátora v kvantovej mechanike. Keby sme chceli myslieť na niečo konkrétne, mohli by sme si predstaviť napríklad atóm v kryštálovej mriežke. Ak atóm vychýlime z rovnovážnej polohy, pôsobia naň sily od ostatných atómov mriežky a pre malé výchylky bude sila rásť s veľkosťou výchylky lineárne a bude mať opačný smer, takže máme situáciu typickú pre oscilátor.

V kvantovej mechanike bude oscilátoru v základnom stave priradená stojatá vlna, t. j. čistý harmonický kmit de Broglieho vlny. Príťažlivá sila $F = -kx$ sa bude snažiť zmenšiť oblasť, v ktorej je vlna veľká. Toto znižovanie oblasti ale pôsobí zväčšenie štvorca hybnosti, a teda aj kinetickej energie. Pri istom rozmere vlny bude celková energia oscilátora minimálna a práve táto situácia zodpovedá stojatej vlne opisujúcej základný stav oscilátora.

Teraz urobíme kvalitatívny odhad. Označme symbolom L maximálnu výchylku oscilácií. Stojatá vlna sa vytvorí zhruba na intervale od $-L$ po $+L$, rozmer vlny môžeme odhadnúť na $2L$ ⁸⁵. Ak dosadíme túto hodnotu do vzťahu (12), získame pre typickú hodnotu druhej mocniny hybnosti odhad

$$p^2 \approx \frac{\hbar^2}{4L^2} \quad (21)$$

Vzhľadom na to, že častica opísaná takouto vlnou bude vo vzdialenosti rovnjej rádovo L od začiatku, ľahko odhadneme potenciálnu energiu

$$E_p \approx \frac{1}{2}m\omega^2 L^2 \quad (22)$$

Pomocou (20), (21) a (22) dostaneme rádový odhad pre energiu stojatej vlny s rozmerom $2L$

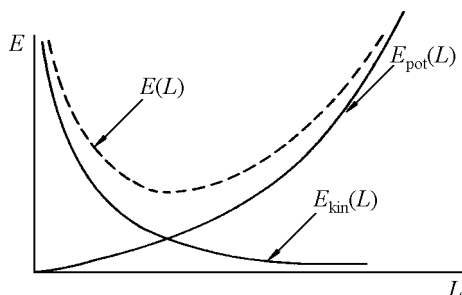
$$E(L) \approx \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{4L^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 L^2 \quad (23)$$

Teraz chceme nájsť minimum pravej strany ako funkcie L . Prvý člen na pravej strane zodpovedá kinetickej a druhý potenciálnej energii

$$E_{\text{kin}}(L) \approx \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{4L^2}, \quad E_{\text{pot}}(L) \approx \frac{1}{2}m\omega^2 L^2 \quad (24)$$

⁸⁵ Presný tvar vlny nebudeme potrebovať, na to by sme museli riešiť Schrödingerovu rovnicu.

Tieto členy spolu s celkovou energiou sú zhruba načrtnuté na obr. 5.2. Vidno odtiaľ, rovnako ako z (24), že kinetická energia je veľmi veľká pri malom L , potenciálna je veľká pri veľkom L a celková energia má výrazné minimum.



Obr. 5.2 Kvalitatívny náčrt priebehu kinetickej – $E_{\text{kin}}(L)$, potenciálnej – $E_{\text{pot}}(L)$ a celkovej – $E(L)$ energie oscilátora v závislosti od rozmeru – L de Broglieho vlny priradenej oscilujúcej častici

Minimum pravej strany v (23) nájdeme jednoducho. Stačí pravú stranu prepísať do tvaru

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{2L} - m\omega L \right)^2 + \hbar\omega/2 \quad (25)$$

Výraz má zrejme minimum vtedy, keď je výraz v zátvorke nulový. Vtedy

$$L \approx \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \quad (26)$$

a pre energiu základného stavu dostávame

$$E_1 \approx \hbar\omega/2 \quad (27)$$

Presný výpočet podľa Schrödingerovej rovnice dáva v tomto prípade rovnakú hodnotu.

5.6 ENERGIA A ROZMER STOJATEJ ELEKTRÓNOVEJ VLNY PRE ZÁKLADNÝ STAV ATÓMU VODÍKA

V tomto článku odhadneme rádo vo hodnotu energie základného stavu atómu vodíka a lineárny rozmer príslušnej stojatej de Broglieho vlny. Budeme pritom postupovať podobne ako v predchádzajúcom článku. Atóm vodíka si predstavujeme ako protón, ktorý sa nachádza v začiatku súradnicovej sústavy a okolo neho vzniká stojatá elektrónová vlna s rozmerom L . Kvalitatívnym spôsobom odhadneme tú hodnotu L , pri ktorej má celková energia elektrónu v poli protónu minimum. V klasickej fyzike je energia bodového elektrónu s nábojom ($-e$) v poli protónu s nábojom $+e$ daná vzťahom⁸⁶

$$E = \frac{1}{2m} p^2 - \frac{Ke^2}{r} \quad (28)$$

kde $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ je druhá mocnina hybnosti elektrónu, $K = 1/(4\pi\epsilon_0)$ – konštanta vystupujúca v Coulombovom zákone, r je vzdialenosť medzi elektrónom a protónom.

Predstavme si teraz elektrónovú vlnu s lineárnym rozmerom L . Typická hodnota hybnosti v tejto situácii je daná vzťahom (12), teda⁸⁷

$$p^2 \approx \frac{\hbar^2}{L^2} \quad (29)$$

⁸⁶ V tomto vzťahu prvý člen reprezentuje kinetickú a druhý potenciálnu energiu. Podrobnejšie sa o výraze (28) zmienime ešte na konci článku.

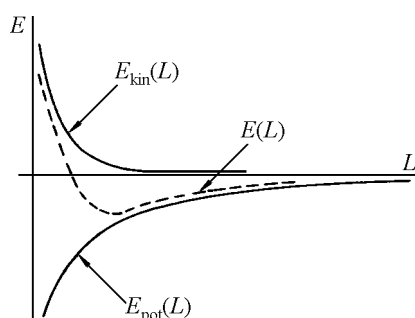
⁸⁷ Vzhľadom na to, že sa zaujíname iba o rádo vo odhad, nebudeme sa trápiť tým, či máme (28) písať pre $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ alebo pre každú zložku hybnosti osobitne.

Pri lineárnom rozmere vlny rovnom L (napríklad si môžeme vlnu predstaviť ako sféricky symetrickú s „polomerom“ rovným približne L) bude veľkosť druhého člena v rovnici (28) rádovo rovná $-Ke^2/L$. Pre celú energiu potom dostávame

$$E(L) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{L^2} - \frac{Ke^2}{L} = E_{\text{kin}}(L) + E_{\text{pot}}(L) \quad (31)$$

Obidva členy aj ich súčet sú na obr. 5.3. Pre malé L prevláda prvý člen a pre veľké L druhý. Súčet oboch členov bude mať pri istom L minimum. Toto minimum nájdeme hneď, ak výraz (30) prepíšeme do tvaru

$$E(L) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{L} - \frac{mKe^2}{\hbar^2} \right)^2 - \frac{mK^2e^4}{2\hbar^2}$$



Obr. 5.3 Približný náčrt kinetickej a potenciálnej energie pre elektrón v atóme vodíka opísaný vlnou s rozmerom rádovo rovným L

Minimum $E(L)$ je zrejme vtedy, keď je výraz v zátvorke nulový. Vtedy

$$L = a_1 = \frac{\hbar^2}{mKe^2}$$

a toto, ako vieme, sa práve rovná Bohrovmu polomeru. Minimálna hodnota E je potom

$$E_1 \equiv E(L = a_1) = -\frac{mK^2e^4}{2\hbar^2} \quad (32)$$

a to je práve hodnota energie atómu vodíka v základnom stave, číselne rovná $-13,6$ eV.

V tomto prípade sme pre E , dostali tiež presnú experimentálnu hodnotu, ale to je viac-menej náhoda, lebo výsledky rádových, kvalitatívnych odhadov sú spravidla presné až na násobok konštantou, ktorá sa pohybuje medzi 0,1 až 10.

Napokon sa ešte vrátíme k výrazu (28) pre celkovú energiu elektrónu v silovom poli protónu. Výraz pre celkovú energiu je vybraný tak, aby sa pri pohybe (klasického) elektrónu v poli protónu celková energia zachovávala. To, že (28) má túto vlastnosť, si ukážeme iba na jednoduchom príklade elektrónu pohybujúceho sa pozdĺž sprievodiča smerom k protónu. Nech v čase t je elektrón vo vzdialenosti $r_1 = r + \Delta r$ od protónu a jeho kinetická energia je $E_{\text{kin}}^{(1)}$. V čase $t + \Delta t$ nech je elektrón vo vzdialenosti $r_2 = r - \Delta r$ od protónu a jeho kinetická energia nech je $E_{\text{kin}}^{(2)}$. Predpokladajme, že celková energia daná vzťahom (28) sa naozaj zachováva. Potom máme

$$E_{\text{kin}}^{(1)} - \frac{Ke^2}{r + \Delta r} = E_{\text{kin}}^{(2)} - \frac{Ke^2}{r - \Delta r}$$

Jednoduchou úpravou dostaneme

$$E_{\text{kin}}^{(2)} - E_{\text{kin}}^{(1)} = \frac{Ke^2}{r - \Delta r} - \frac{Ke^2}{r + \Delta r} = \frac{Ke^2(2\Delta r)}{r^2 - (\Delta r)^2}$$

Pri $\Delta r \ll r$, teda pri malom posunutí, môžeme $(\Delta r)z$ v menovateli zanedbať proti r_2 a máme

$$E_{\text{kin}}^{(2)} - E_{\text{kin}}^{(1)} = \frac{Ke^2(2\Delta r)}{r^2}$$

Fyzikálny význam tejto rovnice je zrejмый. Na ľavej strane je prírastok kinetickej energie elektrónu, na pravej strane súčin sily $F = Ke^2/r^2$ (ktorou protón priťahuje podľa Coulombovho zákona elektrón) a posunutia elektrónu $\Delta s = 2\Delta r$. Súčin $F\Delta r$ je ale prácou, ktorú vykonala Coulombova priťahlivá sila. Teraz by sme mohli celý argument obrátiť. Vyšli by sme z (33), ktorý hovorí, že kinetická energia elektrónu sa mení podľa toho, akú prácu koná Coulombova sila a dostali by sme sa k výrazu (28), ktorý hovorí, že súčet kinetickej a potenciálnej energie elektrónu je konštantný. Fyzikálne sú tieto dve tvrdenia úplne ekvivalentné. V našom argumente sme hovorili len o veľmi malom posunutí Δr . Ak sa ale energia zachováva pri maličkých posunutiach, bude sa zachovávať aj pri veľkých, ktoré sa dajú z takýchto malých posunutí zložiť.

Argument o potenciálnej energii má jeden pedagogický háčik. Na jednom mieste sme totiž brali plne do úvahy veličinu (Δr) a zanedbali sme $(\Delta r)^2$. To, že takéto zanedbanie je korektné, vidno až z diferenciálneho a integrálneho počtu (tu sa ním nebudeme zaoberať). Odporúčame čitateľovi pobesedovať o tejto otázke so starším kolegom alebo „s osobou poučenou“.

5.7 NIEKOĽKO SLOV O HEISENBERGOVI A SCHRÖDINGEROVI

Werner Karl Heisenberg sa narodil 5. decembra 1901 vo Würburgu. Jeho otec sa stal neskôr profesorom gréčtiny na univerzite v Mníchove. Zrejme pod otcovým vplyvom si Heisenberg všimol, že názov mezotrón nie je vhodný pre časticu, ktorú predpovedal Yukawa⁸⁸, a duchu gréčtiny lepšie vyhovuje doteraz používaný termín mezón, odvodený od slova mesos (stredný).

Heisenberg navštevoval Maximilianovo gymnázium v Mníchove, kde sa mu dostalo klasického vzdelania. V septime študoval v origináli Platónov dialóg Timaios, ktorý naň zapôsobil krásou štýlu, hĺbkou myšlienok, ale aj tým, že nastolil večne aktuálny problém štruktúry Vesmíru. Po maturite v roku 1920 odhodlal sa študovať matematiku. Z toho však zišlo a po porade s otcom sa rozhodol pre matematickú fyziku. Tak sa stretol s Arnoldom Sommerfeldom⁸⁹, vtedy profesorom na mníchovskej univerzite. Heisenberg v rozhovore zdôvodňoval, že ho zaujímajú viac filozofické otázky fyziky ako jednotlivé malé úlohy, ktoré fyzika rieši. Sommerfeld na to citoval Schillerove slová o Immanuelovi Kantovi a jeho vykladačoch: „Keď budujú králi, fúrikári majú robotu“. Predovšetkým sme všetci fúrikári – hovoril Sommerfeld – bol presvedčený, že aj takáto práca Heisenberga zaujme a prisľúbil, že mu pridelí úlohu v spojitosti s problémami najnovšej atómovej teórie⁹⁰.

Tak sa stal Heisenberg fyzikom a príslušníkom Sommerfeldovej školy. V lete 1922 umožnil Sommerfeld (doslova umožnil, lebo Heisenberg nemal peniaze na vlak) svojmu poslucháčovi navštíviť Bohrove prednášky v Göttingene. Vtedy prišlo k prvej diskusii medzi Heisenbergom a Bohrom na prechádzke v okolí mesta.

V roku 1923 po obhájení rigorózneho práce (z odboru hydrodynamiky) stal sa Heisenberg Bornovým asistentom v Göttingene a v roku 1924 mu udelili *venia docendi*⁹¹. Na prelome rokov 1924–1925

⁸⁸ Hideki Yukawa sa narodil 23. januára 1907 v Tokiu. Pôsobil v Japonsku a USA. Zomrel vo svojej vlasti 8. septembra 1981. V roku 1935 vyslovil hypotézu o existencii častice s hmotnosťou asi dvestokrát väčšou ako má elektrón. Yukawovu časticu π mezón dokázali experimentálne v roku 1947. V roku 1949 mu udelili Nobelovu cenu za fyziku.

⁸⁹ Arnold Johann Wilhelm Sommerfeld sa narodil 5. decembra 1868 v Kráľovci (terajší Kaliningrad). V rokoch 1908–1940 bol profesorom v Mníchove. V rokoch 1915–1916 rozpracoval kvantovú teóriu eliptických dráh a relativistické korekcie k pôvodnej Bohrovej teórii. Zaviedol tri kvantové čísla, charakterizujúce stav elektrónu v atóme. So Sommerfeldovými kvantovými číslami korešponujú hlavné kvantové číslo n , orbitálne kvantové číslo l a magnetické kvantové číslo m v kvantovej mechanike. (Magnetické kvantové číslo zaviedol spolu s Petrom Josephom Williamom Debyeom). Arnold Sommerfeld napísal dvojzväzkovú monografiu „Atombau und Spektrallinien“ (Stavba atómov a spektrálne čary), ktorá vyšla vo viacerých jazykoch v mnohých vydaniach. Napísal tiež päťzväzkovú učebnicu teoretickej fyziky, ktorá patrila ešte v päťdesiatych rokoch 20. storočia do zlatého fondu učebnicovej literatúry. Z jeho školy vyšli viacerí nositelia Nobelovej ceny W. Heisenberg, W. Pauli, I. Rabi, P. Debye, H. Bethe a i. Arnold Sommerfeld zomrel 26. apríla 1951 v Mníchove.

⁹⁰ Voľne prerozprávané podľa knihy Heisenberg, W.: Der Teil und das Ganze. München R. Piper und Co 1969.

⁹¹ *Venia docendi* v doslovnom preklade znamená „milosť vyučovať“, teda právo prednášať na univerzite. Toto právo nesúviselo s plateným miestom na univerzite.

pracoval ako štipendista Rockefellerovej základiny s Nielsom Bohrom na Kodanskej univerzite. Do Göttingenu sa vrátil na jar 1925. Vtedy sa už črtali obrysy novej teórie. Na seminároch pod vedením Maxa Borna v Göttingene už dali dieťaťu, ktoré sa malo narodiť, aj meno: hovorilo sa o novej kvantovej mechanike. Dieťa sa narodilo za zaujímavých okolností.

Werner Heisenberg dostal v lete 1925 ťažkú sennú nádku, vyžiadal si od Borna dovolenku a odsťoval ďaleko od rozkvitnutých lúk na ostrov Helgoland.

V tom čase Heisenberg už vedel, že v novej teórii treba vybudovať predovšetkým novú kinematiku mikročastíc. V tejto knihe sa nezaoberáme maticovou mechanikou, a preto ani nemôžeme reprodukovat' Heisenbergov myšlienkový postup. Z Heisenbergových spomienok vyberieme ľudskú a vari aj romantickú stránku jeho objavu. „Keď sa pri prvých termoch potvrdila veta o zachovaní energie“ – písal Heisenberg, „dostal som sa do stavu istého vzrušenia, takže som sa pri ďalších výpočtoch vždy znovu dopúšťal chýb. Boli už takmer tri hodiny nad ránom, keď som mal pred sebou konečný výsledok výpočtu.

V prvom okamihu som sa zľakol. Mal som pocit, že sa pozerám cez povrch atomárnych javov na základ pozoruhodnej vnútornej krásy, ležiaci hlboko pod ním a dostal som takmer závrat pri myšlienke, že mám sledovat' túto dokonalosť matematických štruktúr, ktoré príroda predo mnou rozprestrela. Bol som taký vzrušený, že som na spánok nemohol ani pomyslieť. Len čo sa začalo briezdiť, vyšiel som z domu a vybral som sa na južný cíp ostrova. Tam vystupovala z mora osamelá skalná veža, ktorá ma už predtým lákala, aby som na ňu vyliezol. Podarilo sa mi ju bez ťažkostí zdolat' a na jej vrchole som čakal východ Slnka.“

Tak vznikla v roku 1925 Heisenbergova stať O kvantovo-teoretickej reinterpretácii kinematických a mechanických vzťahov⁹², ktorou sa začína v dejinách fyziky éra kvantovej mechaniky⁹³.

Werner Heisenberg potom v roku 1926 prednášal teoretickú fyziku na kodanskej univerzite a v roku 1927 ho povolali za riadneho profesora teoretickej fyziky do Lipska. Nobelovu cenu mu udelili za rok 1932. Prevzal ju v decembri 1933 spolu s Erwinom Schrödingerom a Paulom Diracom, ktorým ju udelili spoločne za rok 1933.

V roku 1941 sa stal profesorom fyziky na berlínskej univerzite a riaditeľom ústavu cisára Wilhelma. Za vojny ho poverili riadením uránového projektu v Nemecku. Nemci však nemali dosť prostriedkov a času, aby vyrobili atómovú bombu. Podľa Heisenberga sa väčšina nemeckých fyzikov ani príliš neusilovala o to, aby takúto zbraň vyrobili.

Ku koncu druhej svetovej vojny Heisenberga spolu s inými fyzikmi Američania internovali v Anglicku, kde sa dozvedel o výbuchu atómovej bomby v Hirošime a Nagasaki. V roku 1946 sa vrátil do NSR a reorganizoval Ústav fyziky v Göttingene, ktorý v roku 1948 premenovali na Fyzikálny a astrofyzikálny ústav Maxa Plancka.

Životná dráha Heisenberga sa zakončila v Mníchove, kam sa presťahoval v roku 1955 spolu s Ústavom Maxa Plancka. Heisenberg sa mimoriadne angažoval pri zriadení Európskeho strediska pre nukleárny výskum (CERN) v Ženeve a ako prezident Humboldtovej základiny pri podpore mladých nadaných fyzikov z celého sveta.

Od mladosti miloval prírodu a popri fyzike sa venoval klasickej hudbe. Aj v neskorších rokoch zostal dušou poetickou. Keď sa ho raz Felix Bloch⁹⁴ opýtal na jeho názor o štruktúre priestoru, Heisenberg mu odpovedal: „Priestor je modrý a lietajú v ňom vtáčiky“.

V roku 1937 sa oženil s Alžbetou Schumacherovou. Bol otcom siedmich detí. Zomrel v Mníchove 1. februára 1976.

Erwin Schrödinger sa narodil 12. augusta 1887 vo Viedni ako jediné dieťa Rudolfa Schrödingera, ktorý sa rok predtým oženil s dcérou Alexandra Bauera, profesora chémie na viedenskej technike.

Schrödinger, ktorý sa neskôr stal zanovitým Heisenbergovým oponentom, mal s ním veľa spoločného: vyrastal pod starostlivým vedením otca, dostal solídne klasické gymnaziálne vzdelanie, bol obdarený genialitou a mal vrúcny vzťah k prírode. Vo všetkom ostatnom sa od Heisenberga odlišoval. Mal uzavretú povahu, bol samotár, ktorý sa nehlásil k nijakej škole a ani nevytvoril nijakú školu. Mal

⁹² Zeitschrift für Physik 33 (1925) 879.

⁹³ Päť Schrödingerových prác začalo vychádzať v časopise Annalen der Physik 79 (1926) o polroka neskoršie.

⁹⁴ Felix Bloch sa narodil 23. októbra 1905 v Zürichu. Nobelovu cenu mu udelili v roku 1952 za práce z oblasti elektrónovej paramagnetickej rezonancie.

odpor k veľkonemeckému nacionalizmu, zakladal si na tom, že pochádza z hlavného mesta dobromyseľných a bodrých Rakúšanov a nedbal na nijaké konvencie.

Na viedenskú univerzitu sa zapísal v roku Boltzmannovej tragickej smrti. Študoval v rokoch 1906–1910 pod vedením Boltzmannovho nástupcu prof. Friedricha Hasenöhrla⁹⁵. Tu si osvojil pri štúdiu mechaniky kontinua matematický aparát, ktorý o dve desaťročia použil pri formulovaní vlnovej mechaniky.

Po skončení štúdia vnikol – ako asistent na viedenskej univerzite – aj do problémov experimentálnej techniky pri spolupráci s Exnerom a Kohlrauschom⁹⁶.

Prvú svetovú vojnu prežil aj na fronte ako delostrelecký dôstojník v rakúsko-uhorskej armáde. Po vojne uvažoval o zmene profesie (chcel sa stať filozofom), ale napokon ostal verný teoretickej fyzike. V roku 1920 sa stal asistentom Maxa Wiena⁹⁷ v Jene a potom mimoriadnym profesorom v Stuttgarte, riadnym profesorom vo Vratislavi a v Zürichu, kde zaujal uvoľnené miesto po Maxovi Laue (1879–1960), nositeľovi Nobelovej ceny za rok 1914. V Zürichu pôsobil v rokoch 1921–1927. Vtedy sa spriatelil s významnými teoretikmi Hermannom Weylom (1885–1955) a Petrom Debyeom (1884–1966, nositeľom Nobelovej ceny za rok 1936). V rokoch 1925–1926 tu formuloval vlnovú mechaniku a napísal rovnice, ktoré sú pomenované po ňom (bezčasová a potom časová Schrödingerova rovnica).

Schrödinger sa v období pionierskych rokov kvantovej teórie tejto disciplíny nevenoval. Vysvetľoval to tým, že pod Hasenöhrlovým a Exnerovým vplyvom dozrieval v atmosfére obdivu k ideám klasickej mechaniky a elektrodynamiky. „Boltzmannove myšlienky – povedal Schrödinger vo svojej nástupnej reči pri prijatí do Berlínskej akadémie vied 4. júla 1929 – zohrali u mňa úlohu vedeckej prvej lásky, nik iný ma už tak neuchvátil a nik iný to už neurobí“⁹⁸.

Schrödinger pokračoval: „S modernou atómovou teóriou som sa iba pomaly zblížil. Jej vnútorné protirečenia zneli ako škripajúce disonancie, keď som ich posudzoval zo zorného uhla čistých, neúprosne jasných Boltzmannových myšlienkových postupov,... Skúmal a zavrhol som mnohé vlastné a cudzie pokusy vytvoriť si najradikálnejšími zmenami opäť jasno. Až de Broglieho myšlienka elektrónových vln, ktorú som rozvinul vo vlnovej mechanike, viedla k istému zlepšeniu situácie“.

Schrödingerovi išlo o dve veci. Po prvé mal experimentálny fakt kvantovania energie elektrónov v atómoch vyplývať z teórie samej a nie z postulátov, vnesených do nej zvonka ako cudzie teleso do harmonického organizmu. Po druhé, nová teória mala zachovať všetky metodologické zásady klasickej mechaniky, t. j. prísny determinizmus a názorný opis mikročastíc v priestore a čase.

Pokiaľ ide o prvé predsavzatie, Schrödingerovi sa skutočne podarilo vybudovať teóriu, z ktorej vyplývajú možné diskkrétne hodnoty energie elektrónov v prípade viazaných stavov a spojité hodnoty energie pre elektróny uvoľnené z atómov v dôsledku ionizácie. Prvý Schrödingerov článok, uverejnený na str. 361 v 79. zväzku *Annalen der Physik* v roku 1926⁹⁹ tak fascinoval Maxa Plancka, že autorovi 2. apríla 1926 napísal: „Čítam Vašu stať so vzrušením, s akým sa dozvedá zvedavé a hlbavé dieťa vyriešenie hádanky, nad ktorou si dlho lámalo hlavu. Teším sa z krásy, ktorá sa odhaľuje pred mojimi očami...“

Menej úspešný už bol Schrödinger so svojím druhým predsavzatím, s klasicou interpretáciou svojej teórie. Napokon sa ustálila kodanská interpretácia, ktorú Schrödinger nikdy neprijal. So zatrpknutosťou raz dokonca povedal na margo kodanskej interpretácie: „Ak máme zotrvať pri tých prekliatych kvantových skokoch, potom ľutujem, že som sa vôbec zaoberal atómovou teóriou“. Schrödingera – ako písal – „odstrašovala, ak nie odpudzovala“, v Heisenbergovom formalizme „transcendentálna algebra a nedostatok názornosti“. Nie všetci významní fyzici reagovali na maticovú a vlnovú mechaniku rovnako. Paul Adrian Maurice Dirac spomína, ako po vypočutí Heisenbergovej prednášky v lete 1925 v Cambridgei a po opätovnom čítaní jeho prvého článku z 29. júla 1925 pochopil, že sa našiel kľúč

⁹⁵ Friedrich Hasenöhrl sa narodil 30. novembra 1874 vo Viedni, zomrel 7. októbra 1917. Rozvíjal Boltzmannovu kinetickú teóriu plynov, nezávisle od Einsteina určil vzťah medzi hmotnosťou a energiou, ktorý sa od Einsteinovho odlišoval koeficientom 4/3.

⁹⁶ Franz Exner (1845–1926) profesor experimentálnej fyziky. Wilhelm Friedrich Kohlrausch (1855–1936), brat Friedricha Wilhelma Kohlrausch (1840–1910) a syn Rudolfa Kohlrausch (1809–1858) pochádzal z rodiny významných experimentálnych fyzikov. Okrem iného spolu s bratom odmeral elektrochemický ekvivalent striebra.

⁹⁷ Max Karl Wien (1866–1938) bol v rokoch 1911–1935 profesorom experimentálnej fyziky v Jene.

⁹⁸ L. Boltzmann považujeme za posledného Mohykána klasickej fyziky

⁹⁹ Článok vyšiel pod nadpisom Kvantovanie ako problém vlastných hodnôt (Prvé oznámenie). Vzápätí vyšli ďalšie tri články pod tým istým názvom ako druhé, tretie a štvrté oznámenie a stať, v ktorej Schrödinger dokazuje ekvivalenciu vlnovej a maticovej mechaniky: O vzťahu Heisenbergovej – Bornovej – Jordanovej kvantovej mechaniky k mojej.

k problémom mikrosveta. Prvé state o vlnovej mechanike na Diraca na rozdiel od Plancka nezapôsobili, lebo mu bol vzdialený matematický aparát, ktorý Schrödinger použil.

Napokon 11. decembra 1933 prof. Peijel predstavil švédskemu kráľovi Heisenberga, Schrödingera a Diraca, aby súčasne prevzali z jeho rúk Nobelovu cenu, najvyššie medzinárodné uznanie, ktoré fyzik môže dosiahnuť.

Ešte predtým sa dostalo Schrödingerovi veľkej pocty, keď prevzal v r. 1927 profesúru v Berlíne po Maxovi Planckovi. Tam zotrval do r. 1933, keď sa nacisti dostali k moci.

Na jeseň toho istého roku vyjadril Schrödinger v rozhovore s Frederikom Alexandrom Lindemannom (neskorším lordom Cherwellom) nevôľu, ktorú pociťoval voči nacistom. Lindemann ho získal pre univerzitu v Oxforde. V r. 1936 mu ponúkli profesúru v Edinburghu aj v Grazi (Štajerskom Hradci). Rozhodol sa vrátiť do svojej vlasti, ale v r. 1938 nacisti obsadili Rakúsko. Schrödinger sa oprávnene cítil ohrozený, lebo jeho emigráciu v r. 1933 do Veľkej Británie považovali nacisti za nepriateľský čin. So svojím príslovečným plecniakom¹⁰⁰ odišiel do Talianska a odtiaľ do Bruselu. Po krátkom pobyte v Belgicku prijal pozvanie írskoho politika de Valeru a usadil sa v Dubline, kde pracoval ako riaditeľ oddelenia pre teoretickú fyziku v novozaloženom Institute for Advanced Studies. Tam zotrval 17 rokov, pracoval v rôznych oblastiach teoretickej fyziky, podobne ako Einstein venoval svoje hlavné úsilie vypracovaniu jednotnej teórie poľa. V r. 1955 sa vrátil do Viedne, kde bol profesorom teoretickej fyziky. Zomrel vo Viedni po dlhej a ťažkej chorobe 4. januára 1961. Pochovali ho v Alpbachu uprostred tirolských hôr.

¹⁰⁰Schrödinger – podobne ako jeho veľký vzor Ludwig Boltzmann – nebol človek škrobený a nepridížal sa konvencií. Svoje osobné veci nosil na cestách, a nielen turistických v plecniaku. S plecniakom cestoval aj na Solvayov kongres. V Bruseli vystúpil s plecniakom na chrbte z vlaku a pešo sa odobral do hotela, kde kongres poriadali.

6 VLNOVÉ FUNKCIE KVANTOVÝCH STAVOV ATÓMU VODÍKA. ŠTRUKTÚRA ZLOŽITEJŠÍCH ATÓMOV

6.1 ÚVOD

V tejto kapitole budeme hovoriť iba o diskretných kvantových stavoch atómov s určitými kvantovanými hodnotami energie. Pre stručnosť ich budeme nazývať „kvantovými stavmi“. Stojaté vlny, alebo čo je to isté, čisté harmonické kmity de Broglieho vln, budeme nazývať, tiež kvôli stručnosti, „vlnovými funkciami“¹⁰¹.

Pri opise vlnových funkcií elektrónu v atóme vodíka vznikajú isté ťažkosti v tom, že sa nemôžeme odvolávať na jednoduchú klasickú analógiu tak, ako sme to robili pri elektróne viazanom na úsečku, kde dobrou analógiou boli harmonické kmity struny. Preto skôr ako by sme sa zaoberali s atómom vodíka, pozrieme sa na vlnové funkcie a energie elektrónu viazaného v kocke s dĺžkou hrany L . Tu existuje tiež dobrá klasická analógia – kmity pružného prostredia v kocke s danou veľkosťou. Pomocou tejto analógie a z toho, čo už o kvantovej mechanike vieme, uhádneme aj tu tvar vlnových funkcií a príslušné hodnoty energie kvantových stavov.

Potom prejdeme k diskusii kvantových stavov elektrónu v atóme vodíka. Obmedzíme sa iba na opis tvaru vlnových funkcií, uvedieme príslušné hodnoty energií kvantových stavov a v niektorých veciach sa odvoláme na prípad elektrónu viazaného v kocke. Tvar vlnových funkcií atómu vodíka budeme ešte potrebovať neskôr pri diskusii smerových vlastností chemickej väzby.

Po atóme vodíka sa zoznámime stručne so spinom elektrónu a s Pauliho princípom a prejdeme k opisu niekoľkých zložitejších atómov.

Napokon sa veľmi krátko zmienime o „exotických“ atómoch, v ktorých je jeden z elektrónov nahradený inou časticou.

6.2 VLNOVÉ FUNKCIE KVANTOVÝCH STAVOV A ENERGIA ELEKTRÓNU VIAZANÉHO V KOCKE

Uvažujme elektrón viazaný na oblasť

$$0 < x < L, \quad 0 < y < L, \quad 0 < z < L \quad (1)$$

Potrebujeme „uhádnúť“ tvar čistých harmonických kmitov de Broglieho vln a príslušné hodnoty energie. V tomto prípade sa opäť môžeme nechať viesť klasickou analógiou. V kapitole 4 sme už skúmali kmity pružného prostredia v kocke (1) a prišli sme k záveru, že tieto kmity budú úmerné výrazu

$$\sin\left(\pi \frac{x}{L_1} n_1\right) \sin\left(\pi \frac{y}{L_2} n_2\right) \sin\left(\pi \frac{z}{L_3} n_3\right) \cos(\omega_{n_1 n_2 n_3} t) \quad (2)$$

kde n_1, n_2, n_3 sú celé kladné čísla. Výraz (2) je vlastne súčinom stojatých vln v smeroch osí x, y, z . Závislosť od času je daná jedinou uhlovou frekvenciou $\omega(n_1, n_2, n_3)$, ktorá závisí od typu kmitu, teda od n_1, n_2, n_3 . Podobne ako pri kmitoch struny aj tu musí byť totiž časová závislosť kmitu daná jedinou frekvenciou.

V kvantovom prípade elektrónu viazaného na oblasť tvaru kocky očakávame teda, že priestorová časť vlnovej funkcie má rovnaký tvar ako priestorová časť výrazu (2), ktorý opisuje kmity klasického

¹⁰¹ V kvantovej mechanike má pojem (kvantového) stavu i pojem vlnovej funkcie širší rozsah ako to, čo sme uviedli. Ale v tejto kapitole ich širší rozsah nebudeme potrebovať.

pružného prostredia. Ostáva nám ešte „uhádnuť“ energiu takéhoto harmonického kmitu de Broglieho vlny. Budeme uvažovať takto. V klasickej fyzike je kinetická energia častice daná výrazom

$$E = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}mv_y^2 + \frac{1}{2}mv_z^2 = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2m}p_z^2 \quad (3)$$

a teda je súčtom kinetických energií odpovedajúcich pohybu častice v smere jednotlivých súradnicových osí. V kvantovom prípade jednorozmerného pohybu elektrónu viazaného na úsečku máme

$$E(n) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (4)$$

a tvar stojatej vlny je opísaný výrazom, ktorý je úmerný

$$\sin\left(\pi \frac{x}{L} n\right)$$

Pravá strana v (2) je súčinom troch takýchto funkcií, čo naznačuje nezávislosť typu kmitu v smere jednotlivých súradnicových osí. Je preto prirodzené predpokladať, že aj v kvantovom prípade bude celková energia kmitu spojeného s priestorovým priebehom harmonického kmitu

$$\psi_{n_1, n_2, n_3} = \sin\left(\pi \frac{x}{L_1} n_1\right) \sin\left(\pi \frac{y}{L_2} n_2\right) \sin\left(\pi \frac{z}{L_3} n_3\right) \quad (5)$$

daná súčtom energií príslušných ku kmitom pozdĺž jednotlivých osí: Takto dostaneme súčet troch výrazov typu (4), pričom kmity v smere osí x, y, z sú charakterizované číslami n_1, n_2, n_3 . Takáto úvaha nás vedie k

$$E(n_1, n_2, n_3) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (6)$$

Výsledky (5) a (6) pre priestorový tvar harmonického kmitu de Broglieho vlny príslušnej k danému kvantovému stavu a pre energiu tohto stavu boli iba uhádnuté. Výpočet v kvantovej mechanike však ukazuje, že sú celkom presné.

Všimnime si teraz niektoré všeobecné vlastnosti riešenia úlohy o vlnových funkciách a energiách elektrónu viazaného v kocke.

Kvantové čísla. Každá vlnová funkcia je určená trojicou celých čísel (n_1, n_2, n_3) nazývaných kvantovými číslami. Ak poznáme túto trojicu, vieme zapísať vlnovú funkciu (5) a určiť energiu (6). Kvantové čísla súvisia s uzlovými rovinami. Vlnová funkcia (5) má nulovú hodnotu na rovinách, kde $\pi x n_1 / L$ je celočíselný násobok π , t. j. pre

$$x = \left(\frac{L}{n_1}\right)k, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (7)$$

Kvantové číslo n_1 , je takto spojené s počtom uzlových rovín kolmých na os x . Podobne je to aj s ďalšími dvoma kvantovými číslami.

Degenerácia energetických hladín. Vlnová funkcia je daná jednoznačne (až na násobenie konštantou) kvantovými číslami n_1, n_2, n_3 , ale nie je jednoznačne daná energiou. Ak jedinej hodnote energie zodpovedá viacero vlnových funkcií, hovoríme o degenerácii tejto energetickej hladiny.

Napríklad vlnovým funkciám $\psi_{1,1,2}(x, y, z)$, $\psi_{1,2,1}(x, y, z)$ a tiež $\psi_{2,1,1}(x, y, z)$ zodpovedá rovnaká hodnota energie

$$E(1,1,2) = E(1,2,1) = E(2,1,1) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \cdot 6$$

Takáto situácia sa vyskytuje aj v klasickej fyzike, keď niekoľko rôznych čistých harmonických tónov odlišujúcich sa tvarom kmitov zodpovedá rovnakej frekvencii. Dva kmitavé pohyby s rovnakou

frekvenciou potom môžeme skladať a ako výsledok dostaneme zas kmitavý pohyb s tou istou frekvenciou.

To isté platí aj v kvantovej mechanike, kde môžeme vytvárať superpozície vlnových funkcií zodpovedajúcich rovnakej energii a ako výsledok dostávame zas kvantový stav s tou istou hodnotou energie. Namiesto troch vlnových funkcií $\psi_{1,1,2}$; $\psi_{1,2,1}$; $\psi_{2,1,1}$ by sme mohli rovnako dobre používať aj tri ich (lineárne nezávislé) kombinácie

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= \alpha_1 \psi_{1,1,2} + \alpha_2 \psi_{1,2,1} + \alpha_3 \psi_{2,1,1} \\ \Phi_1 &= \beta_1 \psi_{1,1,2} + \beta_2 \psi_{1,2,1} + \beta_3 \psi_{2,1,1} \\ \Phi_1 &= \gamma_1 \psi_{1,1,2} + \gamma_2 \psi_{1,2,1} + \gamma_3 \psi_{2,1,1}\end{aligned}\tag{8}$$

kde α_i , β_j , γ_k sú čísla obmedzené len lineárnou nezávislosťou Φ_1 , Φ_2 , Φ_3 (pozri diskusiu o degenerácii kmitov štvorcovej membrány v článku 4.2).

6.3 VLNOVÉ FUNKCIE A ENERGIE KVANTOVÝCH STAVOV ATÓMU VODÍKA

Pri diskusii stojatých vln na strune, na membráne či v kocke sme si ukázali typy kmitov a ako-tak sme to aj zdôvodnili. Teraz si povieme niečo o tom, ako vyzerajú stojaté elektrónové vlny v atóme vodíka. Ale povieme to bez zdôvodnenia, jednoducho preto, že nepoznáme dostatočne jednoduché zdôvodnenie. Presné zdôvodnenie možno dostať v kvantovej mechanike riešením Schrödingerovej rovnice.

Vlnové funkcie elektrónu viazaného v atóme vodíka sú komplikovanejšie ako vlnové funkcie elektrónu viazaného v kocke. Je to tým, že potenciálna energia elektrónu závisí od polohy a toto podstatne ovplyvňuje tvar vlnových funkcií. V ďalšom sa pokúsime o stručný opis týchto funkcií a uvedieme náčrty niektorých z nich.¹⁰²

Vlnové funkcie kvantových stavov elektrónov sú jednoznačne charakterizované trojicou kvantových čísel n , l , m . Pritom hlavné kvantové číslo n je jednoznačne spojené s energiou daného kvantového stavu elektrónu v atóme vodíka

$$E_n = -\frac{mKe^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots\tag{9}$$

Číslo l môže nadobúdať hodnoty $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$. Nazýva sa orbitálnym kvantovým číslom (pretože súvisí s celkovým momentom hybnosti daného kvantového stavu). Číslo m je magnetické kvantové číslo. Pri danom l nadobúda hodnoty $m = -l, -l + 1, -l + 2, \dots, 0, l, \dots, (l - 1), l$.

Každá energetická hladina je takto viacnásobne degenerovaná. Pri danom n máme 1 vlnovú funkciu s $l = 0$ (vtedy $m = 0$), ďalej 3 vlnové funkcie s $l = 1$ (vtedy m môže nadobúdať hodnoty $-1, 0, 1$), 5 hladín s $l = 2, \dots$, a $2(n - 1) + 1$ hladín s $l = (n - 1)$. Spolu je to $1 + 3 + 5 + \dots + (2n - 1) = n^2$ vlnových funkcií. Hovoríme, že energetická hladina príslušná k danej hodnote n je n^2 -násobne degenerovaná.

V atómovej fyzike je zvykom značiť vlnové funkcie nasledovne: najprv napíšeme číslom hlavné kvantové číslo n , za ním napíšeme namiesto čísla l jeho symbol, ktorý zostavujeme podľa kľúča¹⁰³

$$\begin{aligned}l &= 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots \\ \text{označenie: } &s, p, d, f, g, h, \dots\end{aligned}$$

Napríklad $1s$ znamená kvantový stav s $n = 1$, $l = 0$, $2p$ označuje stav s $n = 2$, $l = 1$, $3d$ je stav s $n = 3$, $l = 2$ atď.

Magnetické kvantové číslo zväčša netreba vypísať a ak ho výnimočne treba, píšeme ho priamo: napríklad stav $2p$, $m = 1$ a pod. Názov „magnetické“ kvantové číslo pochádza z toho, že m určuje priemet momentu hybnosti do význačného smeru. Osi súradníc môžeme v priestore orientovať tak, aby

¹⁰² V kapitole o Schrödingerovej rovnici si neskôr ukážeme analytický tvar jej najjednoduchších riešení odpovedajúcich stojatým elektrónovým vlnám.

¹⁰³ Toto označenie bolo zavedené v spektroskopii ešte pred vznikom kvantovej mechaniky.

tento smer splýval s kladným smerom osi z . Magnetické kvantové číslo m určuje zmenu hodnoty energie stavu pri vložení atómu do vonkajšieho magnetického poľa so smerom pozdĺž význačného smeru, teda pozdĺž osi z .

Vlnové funkcie príslušné k daným hodnotám kvantových čísel označujeme ako

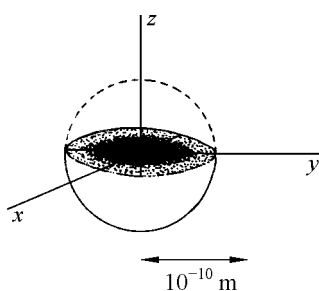
$$\psi_{n,l,m}(x, y, z) \text{ alebo } \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) \quad (10)$$

Absolútne hodnoty týchto vlnových funkcií sú na *obr. 6.1*. Obrázky sú pritom kreslené tak, že na nich uvádzame

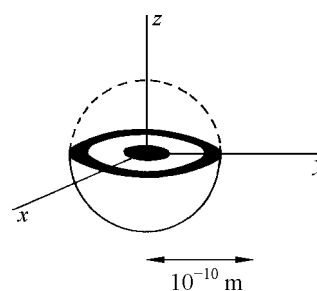
$$\rho_{n,l,m}(\mathbf{r}) = |\psi_{n,l,m}(\mathbf{r})|^2$$

Svetlé miesta označujú oblasti, kde $\rho(\mathbf{r})$ je malé a tmavé miesta oblasti, kde $\rho(\mathbf{r})$ je veľké. Pre stav $1s$ nemáme žiadne uzlové plochy, pre stav $2s$ už máme jednu takúto guľovú uzlovú plochu. Pre stav $2p$ je uzlovou plochou rovina (x, y) atď.

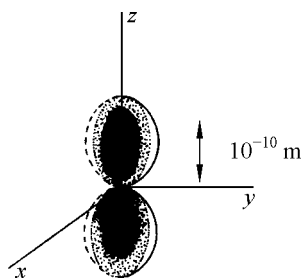
Presné tvary vlnových funkcií dostávame ako riešenia Schrödingerovej rovnice a možno ich nájsť v učebniciach kvantovej mechaniky.



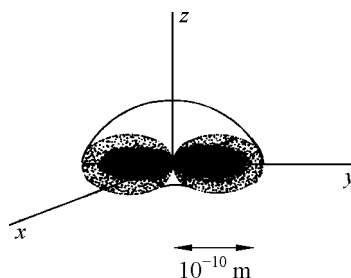
Obr.6.1a Znázornenie druhej mocniny absolútnej hodnoty vlnovej funkcie základného stavu atómu vodíka $|\psi_{100}(\mathbf{r})|^2$. Stav $1s$. Tmavšie miesta označujú väčšie $|\psi_{100}(x, y, z)|$. Pre názornosť je na obrázku prierez gule rovinou $z = 0$



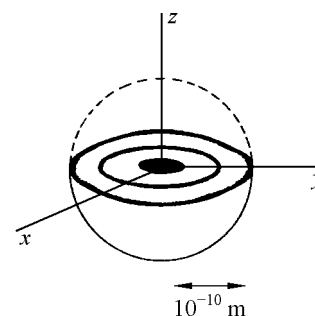
Obr.6.1b Absolútna hodnota druhej mocniny vlnovej funkcie pre stav $2s$: $|\psi_{200}(\mathbf{r})|^2$. Funkcia $|\psi_{200}(\mathbf{r})|^2$ je sféricky symetrická. Pre názornosť sme opäť vyznačili $|\psi_{200}(\mathbf{r})|^2$ iba v jednej rovine $z = 0$



Obr. 6.1c Absolútna hodnota druhej mocniny vlnovej funkcie $|\psi_{210}(\mathbf{r})|^2$. Táto veličina má rotačnú symetriu okolo osi z . Stav $2p, m = 0$



Obr. 6.1d Náčrt $|\psi_{211}(\mathbf{r})|^2$. Táto funkcia pripomína veľký prsteň pripravený pre tenučký prst, ktorý smeruje pozdĺž osi z . Stav $2p, m = 1$. Nakreslili sme iba prierez „prsteňa“ rovinou $x = 0$



Obr. 6.1e Náčrt $|\psi_{300}(\mathbf{r})|^2$. Stav $3s$. Funkcia je sféricky symetrická. Pre názornosť sme nakreslili $|\psi_{300}(\mathbf{r})|^2$ iba v jednej rovine $z = 0$

6.4 SPIN A MAGNETICKÝ MOMENT ELEKTRÓNU

V prvej polovici dvadsiatych rokov sa postupne prišlo k objavu novej, podstatnej vlastnosti elektrónu. Viedli k nej tri skupiny experimentálnych údajov:

– *Rozštiepenie niektorých spektrálnych čiar atómov.* Ukazuje sa, že niektoré spektrálne čiary sú v skutočnosti dvojicami čiar, napríklad v spektre atómu vodíka je čiara zodpovedajúca prechodu

z hladiny $s = n = 3$ na hladinu $s = n = 2$. Jej vlnová dĺžka $\lambda = 656,3$ nm. V skutočnosti sú to ale dve čiary s rozdielom vlnových dĺžok $\Delta\lambda = 0,14$ nm.

– *Rozštiepenie spektrálnych čiar pod vplyvom vonkajšieho magnetického poľa – Zeemanov jav.* Ukázalo sa, že niektoré prípady tohto rozštiepenia bolo možné vysvetliť už podľa „starej“ kvantovej teórie, iné sa správali „anomálne“.

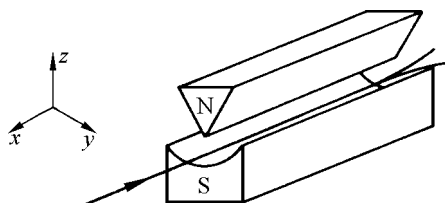
– *Rozštiepenie zväzkov niektorých atómov pri prechode cez silne nehomogénne magnetické pole – experimenty Sterna a Gerlacha.*

Na základe analýzy dát o rozštiepení spektrálnych čiar prišli r. 1925 Goudsmit a Uhlenbeck s hypotézou o tom, že elektrón má aj vlastný moment hybnosti, spin (z anglického: to spin – vrtieť sa). Podľa pôvodnej predstavy mal byť elektrón naozaj guľôčkou, ktorá sa vrtí. Ukázalo sa však skoro, že táto predstava je neudržateľná a že spin elektrónu si nemožno predstaviť klasicky – je to typická kvantovo-mechanická veličina. Zaujímavé je tiež to, že priemet spinu na istý smer v priestore môže nadobúdať iba dve hodnoty. Ak si napríklad za daný smer vyberieme os z a priemet spinu na túto os označíme s_z , potom experiment ukazuje, že môžeme mať iba

$$s_z = +\frac{\hbar}{2} \quad \text{alebo} \quad s_z = -\frac{\hbar}{2} \quad (11)$$

kde \hbar je Planckova konštanta.

Toto z hľadiska klasickej fyziky nepochopiteľné¹⁰⁴ tvrdenie vyplýva z analýzy všetkých troch skupín spomínaných experimentálnych údajov. Najpresvedčivejšie ho ale vidno z experimentov Sterna a Gerlacha, ktoré stručne spomenieme. Schéma experimentu je na obr. 6.2.



Obr. 6.2. Schéma experimentu Sterna a Gerlacha (1921). Zväzok atómov A prechádza medzi pólmi magnetu. Póly majú taký tvar, aby magnetické pole bolo silne nehomogénne. Zväzok sa štípi na dve časti – jednu „hore“, druhú „dole“. (N označuje „severný“ a S „južný“ pól magnetu)

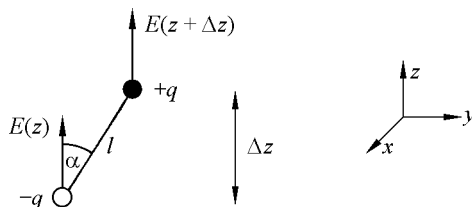
Zväzok atómov, ktoré prechádzajú silne nehomogénnym magnetickým poľom, sa štípi na dve časti. Teória ale jednoznačne ukazuje, že odchýlka atómu od pôvodného smeru je úmerná priemetu magnetického momentu atómu na smer nehomogenity magnetického poľa (na obrázku je to smer osi z). Ďalej sa ukazuje, že magnetický moment je úmerný momentu hybnosti, a preto odchýlka atómu od pôvodného smeru pohybu je daná priemetom momentu hybnosti atómu na smer osi z . V experimentoch v r. 1921 používali Stern a Gerlach zväzok atómov striebra. Tento atóm má 47 elektrónov, ale dnes sa bezpečne vie, že momenty hybnosti aj magnetické momenty prvých 46 elektrónov sa navzájom skompenzujú a ostane jediný elektrón, ktorý sa v experimente prejavuje. Tento elektrón má tiež nulový orbitálny moment hybnosti (t. j. moment hybnosti spojený s pohybom ťažiska častice). Skutočnosť, že zväzok sa rozštiepuje v nehomogénnom poli na dva zväzky, potom ukazuje, že priemet „vnútorného“ momentu hybnosti na os z môže nadobúdať iba dve hodnoty.

Pre ďalšiu diskusiu odtiaľto vyplýva podstatný záver: na úplnú charakteristiku stavu elektrónu potrebujeme zadať aj priemet jeho spinu na určitú os. Ak napríklad uvažujeme elektrón v atóme vodíka, potom na úplné určenie jeho stavu potrebujeme *štyri kvantové čísla*. Tri z nich n , l , m udávajú typ harmonického kmitu de Broglieho vlny a štvrté, spinové, určuje priemet spinového momentu hybnosti elektrónu (stručne spinu) na určitú os, napríklad os z . Úplnú štvoricu kvantových čísel označujeme ako

$$(n, l, m, m_s)$$

¹⁰⁴ V klasickej fyzike je moment hybnosti vektor. Ak jeho absolútnu hodnotu označíme s , potom priemet momentu hybnosti na smer osi z môže nadobúdať ľubovoľnú hodnotu z intervalu $(-s, s)$.

Na záver článku¹⁰⁵ ešte vysvetlíme dve veci, ktoré sú pri analýze experimentu podstatné. Prvou je vychýlenie častice s magnetickým momentom v nehomogénnom poli a druhou súvislosť medzi momentom hybnosti a magnetickým momentom. Magnetický moment sa správa v nehomogénnom magnetickom poli rovnako ako elektrický dipólový moment v nehomogénnom elektrickom poli. Diskusia tohto druhého prípadu je ale názornejšia, preto budeme hovoriť iba o ňom. Predstavme si teda elektrické pole, ktorého intenzita má smer osi z , ale veľkosť poľa závisí od z . V poli máme elektrický dipól, sústavu skladajúcu sa z dvoch nábojov $+q, -q$ v pevnej vzdialenosti l . Situácia je na obr. 6.3.



Obr. 6.3 Elektrický dipól v nehomogénnom elektrickom poli. Čierna guľôčka označuje náboj $+q$, biela náboj $-q$. Vzdialenosť nábojov je l . Uhol medzi smerom dipólu, (smerom od záporného ku kladnému náboju) a smerom intenzity elektrického poľa je α

Na náboj $+q$ pôsobí v smere osi z sila $qE(z + \Delta z)$ na náboj $-q$ sila $-qE(z)$. Celková sila na dipól je

$$F = q[E(z + \Delta z) - E(z)] = q\Delta z \cdot \frac{\Delta E}{\Delta z}$$

Veľičina $\Delta E/\Delta z = [E(z + \Delta z) - E(z)]/\Delta z$ udáva ako rýchlo sa mení pole v smere osi z . Z obrázku tiež vidno, že $\Delta z = l \cos \alpha$. Výraz $ql = d$ nazývame dipólovým momentom. Celková sila teda je

$$F = d \frac{\Delta E}{\Delta z} \cos \alpha$$

Vidno, že sila závisí od uhla medzi smerom dipólového momentu a smerom nehomogenity poľa a mení sa spojitě pri spojitě zmene uhla α .

Teraz prejdeme k súvisu medzi momentom hybnosti častice a jej magnetickým momentom. Budeme vychádzať z dvoch známych vzťahov. Prvý hovorí, že častica pohybujúca sa po kruhovej trajektórii s polomerom r rýchlosťou v má moment hybnosti

$$L = mvr \quad (12)$$

a druhý hovorí, že prúd I , ktorý tečie po obvode kruhu s plochou S , je ekvivalentný magnetickému momentu s veľkosťou

$$\mu = IS \quad (13)$$

Ak sa častica pohybuje po kružnici s polomerom r rýchlosťou v , potom za sekundu prejde daným miestom $n = v/(2\pi r)$ -krát. Ak má náboj q , potom daným miestom kružnice prejde za sekundu náboj $Q = nq$. Takáto krúžiaca častica je teda ekvivalentná prúdu $I = nq = vq/(2\pi r)$. Magnetický moment takéhoto prúdu je

$$\mu = IS = \frac{vq}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{vqr}{2}$$

Po násobení čitateľa a menovateľa hmotnosťou častice a po využití (12) nájdeme

$$\mu = \frac{q}{2m} mvr = \frac{q}{2m} L$$

¹⁰⁵ Zvyšok článku však nie je podstatný pre chápanie ďalšieho textu.

Pretože moment hybnosti aj magnetický moment sú vektory kolmé na uvažovanú kružnicu, platí tento vzťah aj pre príslušné vektory

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m} \mathbf{L} \quad (14)$$

Vzťah (14) sme odvodili iba pre pohyb klasickej častice. Hlbšia analýza však ukazuje, že platí aj pre pohyb sústavy klasických častíc.

Nemožnosť opísať spinový moment hybnosti týmto spôsobom je naznačená aj tým, že experimenty dokazujú pre spin platnosť vzťahu

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{m} \mathbf{s} \quad (15)$$

odlišujúceho sa dvojkou od vzťahu (14).

Vzťah (15) je skrátenejším zápisom troch vzťahov

$$\mu_x = \frac{q}{m} s_x; \quad \mu_y = \frac{q}{m} s_y; \quad \mu_z = \frac{q}{m} s_z \quad (15')$$

pre zložky magnetického momentu elektrónu μ_x, μ_y, μ_z a vlastného, t. j. spinového momentu hybnosti elektrónu s_x, s_y, s_z . Pritom m označuje hmotnosť a $q = -e$ náboj elektrónu.

6.5 ATÓMY S VIACERÝMI ELEKTRÓNMI. PAULIHO PRINCÍP

Objav Mendelejevovej periodickej sústavy mal obrovský význam pre systematizáciu chemických vlastností prvkov. Bolo preto len prirodzené, že s každým ďalším krokom v poznaní štruktúry atómov sa fyzici snažili vysvetliť Mendelejevovu tabuľku. Prvými vážnymi pokusmi boli Bohrove práce, ktoré napísal ešte pred vznikom kvantovej mechaniky.

Pre konečné riešenie problému sa však ukázal rozhodujúcim Pauliho princíp¹⁰⁶, ktorý hovorí

V sústave obsahujúcej viacero elektrónov môže byť v danom (jednoelektrónovom) stave najviac jeden elektrón.

Pre objasnenie obsahu Pauliho princípu sa budeme najprv zaoberať veľmi zjednodušeným príkladom. Uvažujme niekoľko elektrónov, viazaných na danú úsečku s dĺžkou L . Vzájomnú interakciu elektrónov budeme zanedbávať.

Stavy, v ktorých sa na úsečke môže nachádzať jediný elektrón, sú charakterizované jediným kvantovým číslom n a príslušné energie sú

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \cdot n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Teraz už vieme, že na určenie stavu elektrónu potrebujeme určiť aj priemet jeho spinu na os z , ak je $s_z = \hbar/2$, budeme stav označovať symbolom \uparrow , ak je $s_z = -\hbar/2$, použijeme znak \downarrow . Danému n teda zodpovedajú dva stavy, ktoré označíme $(n\uparrow)$, $(n\downarrow)$. Predstavme si teraz, že na jednu a tú istú úsečku budeme postupne „dodávať“ elektróny a budeme hľadať stav, v ktorom je energia sústavy elektrónov minimálna. Prvý elektrón takto obsadí jeden zo stavov s najnižšou energiou, nech je to stav $(1\uparrow)$, druhý obsadí stav $(1\downarrow)$. Ďalší elektrón už podľa Pauliho princípu musí obsadiť stav s $n = 2$. Nech je to $(2\uparrow)$. Ďalší elektrón bude v stave $(2\downarrow)$, piaty príde do stavu $(3\uparrow)$ atď.

Od tohto príkladu prejdeme rovno k rozdeleniu elektrónov v niekoľkých najľahších atómoch.

Atóm H. Tu máme jediný elektrón v stave s kvantovými číslami $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$. Hovoríme, že máme jeden $1s$ elektrón, čo zapisujeme tiež ako $(1s)^1$, kde symbol v zátvorke označuje stav a index písaný ako exponent hovorí, koľko elektrónov je v tomto stave.

¹⁰⁶ Wolfgang Pauli formuloval svoj princíp v roku 1924 a uverejnil o ňom článok v r. 1925, ešte pred vznikom kvantovej mechaniky. Bližšie o tom v dodatku k tejto kapitole.

Atóm He. V tomto atóme sú dva elektróny a obidva môžu obsadiť stav $1s$. Hovoríme, že elektrónová konfigurácia atómu hélia je $(1s)^2$. Priemety spinov týchto elektrónov na os z musia byť opačné, ak jeden z nich je \downarrow , druhý musí byť \uparrow . Elektróny sa už nepohybujú v čisto coulombovskom poli jadra s nábojom $+2e$, ale v „tíenom“ poli. Je to tým, že prvý elektrón tieni do istej miery náboj jadra pre druhý elektrón a naopak. So zreteľom na to, že oba elektróny práve zaplnia hladinu s $n = 1$, je základný stav hélia veľmi stabilný a hélium sa správa preto ako inertný plyn.

Atóm Li. Prvé dva elektróny opäť obsadia stav $(1s)$, tretí elektrón musí obsadiť už stav $(2s)$. Elektrónová konfigurácia je $(1s)^2 (2s)^1$. Dva elektróny, ktoré sa nachádzajú v stave $(1s)$, sú pevne viazané k jadru a nezúčastňujú sa na chemických reakciách. Tretí elektrón $(2s)^1$ je valenčný. Lítium je preto jednomocné.

Atóm Be. V základnom stave berýlia je elektrónová konfigurácia $(1s)^2 (2s)^2$. V atóme vodíka vzbudeným stavom $(2s)$ a $(2p)$ patrí rovnaká energia. Toto ale platí len pre čisto coulombovské pole. V atóme, kde je viacero elektrónov, pole už nie je čisto coulombovské a medzi hladinami $(2s)$ a $(2p)$ je malý energetický rozdiel. Ak jeden z elektrónov v stave $(2s)$ prechádza do $(2p)$, energia atómu sa nevyhnutne zvýši, ale toto zvýšenie môže byť menšie ako energia, ktorú atóm získa pri chemickej väzbe v molekule. Preto v chemických zlúčeninách bude elektrónová konfigurácia berýlia $(1s)^2 (2s)^1 (2p)^1$.

Atóm B. Elektrónová konfigurácia atómu bóru v základnom stave je $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^1$.

Atóm C. Základná konfigurácia atómu uhlíka je $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^2$. V stave $2p$ môže byť spolu 6 elektrónov. Tento stav má totiž $l = 1$ a magnetické kvantové číslo môže nadobúdať tri hodnoty $m = -1, 0, 1$. V každom stave s daným (n, l, m) ale môžu byť dva elektróny, ktoré sa odlišujú priemetom spinu na určitú os. V zlúčeninách sa elektrónová konfigurácia atómu uhlíka mení a o tom budeme ešte hovoriť neskôr.

Atóm N. V atóme dusíka je elektrónová konfigurácia $(1s)^2 (2s)^1 (2p)^3$ a dusík býva trojmocný, ako to vidno napríklad na molekule čpavku NH_3 .

Atóm O. Kyslík má v základnom stave konfiguráciu $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^4$.

Atóm F má 9 elektrónov, 2 sú v $(1s)$ stave, 2 v $(2s)$ stave a 5 je v stave $(2p)$. Do zaplnenia hladiny s $n = 2$ chýba už len jeden elektrón. Odtiaľ pochádzajú typické vlastnosti fluóru.

Atóm Ne. V neóne je celkom zaplnená hladina s $n = 2$. Jeho konfigurácia má tvar $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6$. Dôsledkom zaplnenej hladiny sú chemické vlastnosti neónu. Je to inertný plyn.

Atóm Na. Sodík má 11 elektrónov, z toho 2 sú na zaplnenej hladine s $n = 1$, 8 na zaplnenej hladine s $n = 2$ a jedenásty, valenčný elektrón začína zaplňať hladinu s $n = 3$. Vlastnosti sodíka sú preto podobné vlastnostiam lítia.

Podobným spôsobom možno pokračovať po celej Mendelejevovej tabuľke. Vysvetlenie chemických vlastností prvkov je veľmi prirodzené, aj keď sa na niektorých miestach ukazujú zaujímavé črty. Pri argóne máme napríklad zaplnené stavy $(1s)$, $(2s)$, $(2p)$, $(3s)$, $(3p)$. Pri nasledujúcom prvku ďalší elektrón neobsadzuje tak, ako by sme očakávali stav $(3d)$ ale stav $(4s)$. Prvok s touto konfiguráciou je draslík. Stav $(4s)$ tu má nižšiu energiu ako $(3d)$ vďaka tomu, že odchýlky od coulombovského potenciálu sú tu už veľmi silné.

6.6 EXOTICKÉ ATÓMY

„Obyčajné“ atómy sa skladajú z jadier a z elektrónov. Umelo ale možno vytvoriť aj systavy, kde namiesto jedného z elektrónov máme inú časticu. Najznámejším prípadom sú mezoatómy, kde namiesto jedného z elektrónov je iná elementárna častica: záporne nabitý μ mezón¹⁰⁷. Táto častica je v mnohom podobná elektrónu, podstatne sa od neho odlišuje tým, že je zhruba 206,7-krát ťažšia ako elektrón. Stojatá vlna μ mezónu v atóme sa preto správa podstatne inakšie ako elektrónová vlna.

V kapitole 3 sme pri rozmerovej analýze zistili (a v kapitole 5 sme prišli k rovnakému výsledku), že rozmer oblasti, v ktorej je elektrónová vlna v atóme vodíka veľká, je daný Bohrovým polomerom

$$a_1 = \frac{\hbar^2}{m_e K e^2} = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (16)$$

¹⁰⁷ Ako prvý vytvoril mezoatómy v r. 1953 americký fyzik Leo James Rainwater, narodený 19. decembra 1917 v Council v štáte Idaho (USA), nositeľ Nobelovej ceny za rok 1975.

Tú istú analýzu môžeme urobiť aj pre sústavu skladajúcu sa z protónu a z μ mezónu, a pre rozmer vlnovej funkcie dostaneme

$$a_1^{(\mu)} = \frac{\hbar^2}{m_\mu K e^2} = \frac{m_e}{m_\mu} a_1 = 2,56 \cdot 10^{-13} \text{ m} \quad (17)$$

μ mezón sa preto bude pohybovať veľmi blízko k jadrú. Energie kvantových stavov takéhoto atómu budú tiež podstatne odlišné ako pri atóme vodíka. Pre kvantové stavy atómu vodíka máme

$$E_n = -\frac{m_e K^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

Pre μ mezónový atóm „vodíka“ bude všetko rovnaké, len hmotnosť častice bude väčšia

$$E_n^{(\mu)} = \frac{m_\mu}{m_e} E_n = -13,6 \text{ eV} \cdot \frac{m_\mu}{m_e} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Po dosadení máme

$$E_n^{(\mu)} = -2,81 \text{ keV} \frac{1}{n^2}$$

kde keV (kiloelektrónvolt) sa rovná 10^3 eV. Pri prechode medzi dvoma hladinami μ -vodík vyžaruje fotóny s energiami

$$E_m^{(\mu)} - E_n^{(\mu)} = 2,81 \text{ keV} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

a táto energia odpovedá už tvrdému röntgenovému žiareniu a nie fotónom viditeľného svetla.

Ešte zaujímavejšia situácia nastáva pri ťažších atómoch. Uvažujme pre určitost' atóm cínu, ktorý je na päťdesiatom mieste Mendelejevovej periodickej tabuľky. Jeho jadro má preto náboj Ze , kde $Z = 50$ a v obyčajnom atóme cínu (chemická značka Sn) sa nachádza 50 elektrónov. Ak jeden z týchto elektrónov nahradíme μ mezónom, bude sa tento pohybovať oveľa bližšie k jadrú ako elektróny, a preto bude cítiť celé neodtienené pole jadra. Elektróny, ktoré sú prítomné v atóme, nebudú mať na pohyb μ mezónu prakticky nijaký vplyv – o tom, prečo je to tak, sa ešte zmienime na konci článku. Navyše μ mezón nie je viazaný Pauliho princípom, lebo tento princíp platí len pre rovnaké častice a μ mezón je iný ako všetky elektróny v atóme. Preto sa μ mezón správa prakticky tak, ako keby bol v atóme sám a cítil pole jadra umiestneného v strede atómu s nábojom Ze . Do výrazu pre Coulombovu príťažlivú silu vstupuje Z v kombinácii Ze^2 , preto

$$F = K \frac{(Ze)e}{r^2} = K \frac{Ze^2}{r^2}$$

Rozmer vlnovej funkcie takéhoto μ mezónu v jadre cínu dostaneme teda tak, že do vzťahu (17) dosadíme namiesto Ke^2 výraz $KZe^2 = 50 Ke^2$. Pre príslušný rozmer vlnovej funkcie základného stavu takto máme

$$a_{1,\text{Sn}}^{(\mu)} = \frac{\hbar^2}{m_\mu ZKe^2} = 5,12 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (18)$$

Tento polomer je už veľmi malý a je porovnateľný s polomerom samotného jadra. Z experimentov s rozptylom veľmi rýchlych elektrónov na jadrách je totiž známe, že polomer jadra je zhruba daný vzťahom

$$R \approx (N_p + N_n)^{1/3} \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

Vo vzťahu je N_p počet protónov a N_n počet neutrónov v jadre. Pre cín $N_p + N_n = 118$, a preto

$$R_{\text{Sn}} \approx \sqrt[3]{118} \cdot 10^{-15} \text{ m} \approx 4,9 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (19)$$

Podľa tohto by sa mal μ mezón pohybovať čiastočne vnútri jadra. A je to skutočne tak, lebo μ mezón málo interaguje s časticami, z ktorých sa jadro skladá. Je ale nabitou časticou, a preto je citlivý na rozloženie náboja v jadre. Keby jadro bolo bodové, boli by energie μ mezónových kvantových stavov v atóme cínu dané vzťahom

$$E_{n,\text{Sn}}^{(\mu)} = -\frac{m_{\mu} K^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \approx -7 \text{ MeV} \frac{1}{n^2} \quad (20)$$

kde $\text{MeV} = 10^3 \text{ keV} = 10^6 \text{ eV}$. Pri prechodoch medzi hladinami atóm vysiela veľmi tvrdé γ kvantá.

Vzťah (20) je ale iba približný a to čiastočne preto, že nezahŕňa efekty spôsobené rozložením náboja v jadre a čiastočne preto, že typická rýchlosť μ mezónu v základnom stave (pozri podobný odhad pre elektrón v atóme vodíka v kap. 3) bude

$$v_{1,\text{Sn}}^{(\mu)} \approx \frac{ZKe^2}{\hbar} \approx Z \left(\frac{Ke^2}{\hbar c} \right) c \approx 0,36 c$$

čo už je porovnateľné s rýchlosťou svetla a relativistické efekty už nemožno celkom zanedbať. Kvantové stavy μ mezónov v ťažších atómoch treba už potom overovať relativistickými rovnicami. Analýzou údajov o rozdieloch energií medzi jednotlivými kvantovými stavmi možno potom získať istú informáciu o rozdelení náboja v atómovom jadre.

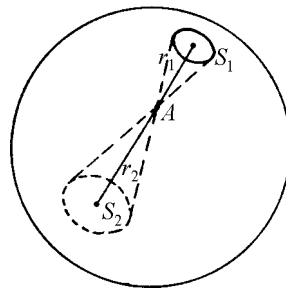
Pre úplnosť treba ešte povedať, že μ mezón je nestabilná častica a jej doba života je zhruba $2,2 \cdot 10^{-6} \text{ s}$. Preto μ mezónový atóm žije len takýto čas. Ale na atómové pomery je to čas skutočne obrovský, lebo typický čas pre procesy v mezoatóme je rádovo

$$T \approx \frac{a_{1,\text{Sn}}^{(\mu)}}{v_{1,\text{Sn}}^{(\mu)}} \approx \frac{5 \cdot 12 \cdot 10^{-15} \text{ m}}{0,36 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}} \approx 1,4 \cdot 10^{-22} \text{ s}$$

Doba života μ mezónu teda obsahuje okolo 10^6 prirodzených „atomárnych jednotiek“ pre pohyb μ mezónu v atóme cínu a za tento čas μ mezón uskutoční niekoľko prechodov medzi kvantovými hladinami.

Dost' podrobne známym systémom je pozitronium – sústava skladajúca sa z elektrónu a jeho antičastice – pozitronu.

* * *



Obr. 6.4 Ilustrácia tvrdenia, že intenzita elektrického poľa vnútri homogénne nabitého guľového povrchu sa rovná nule. A je bod vnútri gule, S_1 je plôška na povrchu, vzdialená r_1 od bodu A , S_2 je plôška na povrchu vzdialená r_2 od bodu A

Napokon ešte uvedieme sľúbený argument o tom, prečo μ mezón pohybujúci sa vnútri atómu cínu je ovplyvnený iba jadrom a nie elektrónmi. Najprv si pripomeňme jednu skutočnosť, ktorú poznáme z gymnaziálnej fyziky. Uvažujme rovnomerne nabitý povrch gule, ako je na obr. 6.4. Vnútri takéhoto povrchu je intenzita elektrického poľa nulová. Náboj na plôške S_1 je rovný $S_1 \rho$, kde ρ je plošná hustota náboja, S_1 je veľkosť plôšky. Ak označíme $\Delta\Omega$ priestorový uhol, pod ktorým vidíme plôšku S_1 z bodu A , máme $S_1 = r_1^2 \Delta\Omega$ a náboj na plôške S_1 je

$$Q_1 = r_1^2 \rho \Delta \Omega$$

Intenzita poľa, ktorú tento náboj budí v bode A , je

$$E_1 = K \frac{Q_1}{r_1^2} = K \rho \Delta \Omega$$

Podobne intenzita od plôšky S_2 (na druhej strane gule) v bode A , je

$$E_2 = K \frac{Q_2}{r_2^2} = K \rho \Delta \Omega$$

Intenzity E_1 , E_2 majú opačný smer a rovnakú veľkosť a ich súčet sa rovná nule. Celý povrch gule môžeme rozložiť na takéto, vzájomne sa kompenzujúce plôšky a výsledná intenzita v bode A sa rovná nule. Argument platí zrejme pre každý bod vnútri gule.

Ak je vrstva, na ktorej je rozložený náboj hrubá, môžeme si ju predstaviť ako zloženú z tenkých guľových vrstiev a argument platí znovu pre každý bod vnútri takejto vrstvy.

V μ mezoatóme cínu sa μ mezón pohybuje vnútri spojitého rozloženia náboja vytvoreného elektrónmi. Hustotu tohto rozloženia náboja možno zhruba tiež opísať ako rozloženie náboja v hrubej vrstve a intenzita elektrického poľa vnútri nej sa bude rovnať nule. μ mezón pohybujúci sa blízko jadra cíti preto iba silové pole samotného jadra.

6.7 WOLFGANG PAULI – VYLUČOVACÍ PRINCÍP A DISKUSIE OKOLO SPINU

Wolfgang Pauli sa narodil 25. apríla 1900 vo Viedni v rodine lekára, neskoršie univerzitného profesora Wolfganga Josepha Pauliho. Ako štrnásťročný preštudoval Eulerov Úvod do infinitezimálneho počtu. 2. júla 1918 maturoval s vyznamenaním vo Viedni a už 22. septembra toho istého roku posielal do časopisu *Physikalische Zeitschrift* článok *O zložkách energie gravitačného poľa*, ktorý podľa Sommerfelda „okamžite vzbudil Einsteinovu pozornosť a obdiv“. Vzápätí napísal ďalšie tri články o všeobecnej teórii relativity, vrcholné dielo na túto tému napísal v treťom ročníku svojho vysokoškolského štúdia. V Encyklopédii matematických vied, ktorú vydával Felix Klein, vyšla Pauliho stať o všeobecnej teórii relativity. Práca bola pozoruhodná tak svojím veľkým rozsahom, ako aj hlbokým obsahom. Max Born ju komentoval v liste Einsteinovi slovami: „Tento malý chlapík nie je iba múdry, ale aj usilovný.“

V tom istom roku skončil Pauli štúdiá v Mníchove, 25. júla bol promován s vyznamenaním.

Počas štúdií v Mníchove (1918–1921) sa Pauli spriatelil s Heisenbergom, s ktorým spoločne navštevoval Sommerfeldove semináre. Z Heisenbergových spomienok (citovaných na s. 210) sa dočítame, že už vtedy sa v spoločných diskusiách rodili základné myšlienky budúcej kvantovej mechaniky. Heisenberg potom pokračuje: „V celom neskoršom období, pokiaľ žil, bol (Pauli) pre mňa a pre to, o čo som sa vedecky usiloval, vždy v úlohe vítaného, aj keď veľmi ostrého kritika a priateľa“.

Po promócii odchádza Pauli na jeden semester do Göttingenu, kde sa zblížil s Bornom. V máji 1922 prijal miesto asistenta u profesora Wilhelma Lenza (tiež odchovanca Sommerfeldovej školy) v Hamburgu, pokračoval však aj v spolupráci s Bornom v Göttingene. Tam sa tiež stretol v júni 1922 s Bohrom. Tak sa začalo trvalé, vrelé priateľstvo týchto dvoch mužov. Pauli odchádza na ročný pobyt do Kodane, v októbri 1923 sa vracia do Hamburgu, kde od r. 1924 pôsobil ako docent a od novembra 1926 ako univerzitný profesor. V apríli 1928 vymenovali Pauliho za riadneho profesora teoretickej fyziky na slávnej Konfederálnej vysokej škole technickej v Zürichu. Tu pôsobil Pauli až do svojej smrti 15. decembra 1958 s výnimkou rokov 1935–1936, 1940–1945, 1949–1950 a 1954 keď pracoval v Spojených štátoch amerických v Institute for Advanced Study v Princetone. Počas vojny odmietol akúkoľvek účasť na atómovom projekte. Nobelovu cenu udelili Paulimu v roku 1945 za objav vylučovacieho princípu, nazvaného po ňom.

Z dokumentov vyplýva, že Pauli objavil vylučovací princíp v roku 1924. Uverejnil o tom článok v *Zeitschrift für Physik* 31 (1925) 765 pod názvom: *O vzťahu uzatvárania skupín elektrónov v atóme s komplexnou štruktúrou spektier*. Článok je pozoruhodný nasledujúcimi tvrdeniami, ktoré spolu súvisia:

1. Stav elektrónu je charakterizovaný štyrmi a nie tromi kvantovými číslami.
2. Pomocou štvorice kvantových čísel možno vysvetliť zapĺňanie energetických hladín elektrónmi v atónoch a teda aj Mendelejevovu periodickú sústavu prvkov.
3. Štvrté kvantové číslo vyjadruje novú kvantovomechanickú vlastnosť elektrónu, ktorú Pauli označil ako dvojnásobnosť elektrónu neopísateľnú klasicky.

Prvá schéma zapĺňania energetických hladín pomocou troch kvantových čísel pochádza od Bohra. Z Mendelejevovej tabuľky sa dá vyčítať, že pri vzácnych plynoch, pri ktorých sú všetky energetické hladiny zaplnené elektrónmi, je n -tá hladina zaplnená $2n^2$ elektrónmi, kde $n = 1, 2, 3, 4, \dots$, je hlavné kvantové číslo. Bohr rozdelil elektróny v podstate rovnomerne do podhladin, takže podľa neho konfigurácia elektrónového obalu v atónoch vzácnych plynov bola takáto

Prvok	Protónové číslo	Počet elektrónov v hladine														
		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	6s	6p
He	2	2	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
Ne	10	2	4	4	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
Ar	18	2	4	4	4	4	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
Kr	36	2	4	4	6	6	6	4	4	–	–	–	–	–	–	–
Xe	54	2	4	4	6	6	6	6	6	6	–	4	4	–	–	–
Rn	86	2	4	4	6	6	6	8	8	8	8	6	6	6	4	4

Bohr sám vo svojom článku z roku 1924 považoval svoje zadelenie elektrónov do hladín za hypotetické a neuspokojivé.

V tom čase vyšlo štvrté vydanie Sommerfeldovej knihy Stavba atómov a spektrálne čiary, o ktorej sme sa už zmienili. Sommerfeld v úvode k tomuto vydaniu upozornil na zaujímavú prácu Stonera¹⁰⁸, ktorý ukázal, že k obsadzovaciemu číslu elektrónov v atónoch dospejeme, ak bez prihliadnutia na hlavné kvantové číslo n obsadíme všetky s -hladiny 2 elektrónmi, všetky p -hladiny 6 elektrónmi, všetky d hladiny 10 elektrónmi podľa schémy¹⁰⁹ $2(2l + 1)$, kde $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$. Tak dostal pre s -hladiny ($l = 0$) dva elektróny, pre p -hladiny ($l = 1$) 6 elektrónov atď.

Pauli nadviazal na Stonerovu prácu a ukázal, že stav elektrónu v atóme treba označiť štyrmi kvantovými číslami, ktoré označil n, k_1, k_2, m_1 . Ukázal, že týmito kvantovými číslami sú ekvivalentné čísla n, k_1, m_1, m_2 . Ak nazveme n hlavné kvantové číslo, $l = k_1 - 1$ orbitálne kvantové číslo, $m_1 = m$ magnetické kvantové číslo, $m_2 = m_s$ spinové kvantové číslo s hodnotami $\pm \frac{1}{2}$ vidíme, že Pauliho schéma sa zhoduje

s označením stavu elektrónu v súčasnej kvantovej mechanike. Pauli potom vysvetlil obsadzovanie elektrónových hladín princípom, ktorý zdôvodnil najprv pre atómy v silnom magnetickom poli a napokon postuloval pre všetky atómy. Pauliho princíp sa stal neskoršie významným princípom kvantovej mechaniky. Hlbšie zdôvodnenie tohto princípu (v rámci kvantovej teórie poľa) pochádza tiež od Pauliho. Uverejnil ho v roku 1940 v článku *Súvis medzi spinom a štatistikou* (Phys. Rev. 58, 716-722 (1940)).

Formulovaním vylučovacieho princípu sa zďaleka nevyčerpal Pauliho príspevok k vývinu modernej fyziky. V roku 1927 vysvetlil (už podľa teórie spinu) paramagnetizmus elektrónového „plynu“ v kovoch. Teóriu takéhoto plynu pri veľmi nízkych teplotách vypracoval spolu s Fermim¹¹⁰; ďalej vybudoval nerelativistickú teóriu elektrónového spinu (1927) a v r. 1929 s Heisenbergom bol pri kolíske kvantovej elektrodynamiky. V roku 1931 predpovedal existenciu častice s nepatrnou pokojovou hmotnosťou, ktorú

¹⁰⁸ Edmund Clifton Stoner sa narodil 2. októbra 1889 v East Molesey (Surrey, Anglicko), študoval v Cambridgei. Od r. 1951 bol profesorom v Cambridgei. Ako 25-ročný publikoval v Philosophical Magazine 48 (1924) 719-736 článok *Rozdelenie elektrónov do hladín atómov*. Zomrel 6. februára 1973 v Leedse.

¹⁰⁹ Pre zjednodušenie tu používame súčasné označenie. V pôvodnej schéme používal kvantové číslo k , ktoré prebiehalo hodnoty $k = 1, 2, \dots, n$ a schému napísal v tvare $2(2k - 1)$

¹¹⁰ Enrico Fermi sa narodil 29. septembra 1901 v Ríme. V roku 1934 objavil umelú rádioaktivitu vyvolanú neutrónmi a zvýšil účinnosť jadrových reakcií vyvolaných neutrónmi ich spomalením. Za tieto práce mu v roku 1938 udelili Nobelovu cenu. Emigroval do USA, kde v decembri 1942 v Chicagu spustil prvý jadrový reaktor. Zomrel 28. novembra 1954 v Chicagu.

Fermi nazval neutríno (častica bola experimentálne objavená v r. 1956 Reinesom, Cowanom a ich spolu-pracovníkmi. Fyzici boli o jej existencii presvedčení už od r. 1934, keď Fermi sformuloval úspešnú teóriu beta rozpadu neutrónu). Významné boli aj jeho ďalšie príspevky do teórie elementárnych častíc.

Ale ani výpočtom Pauliho početných prác sa jeho význam pre modernú fyziku nevyčerpáva.

„Po štyri desaťročia ovplyvňoval fyziku myšlienkami, podnetmi, varovaniami a kritikou“ – hovorí profesor dejín fyziky Armin Hermann¹¹¹. Pauliho mladší druh Weisskopf¹¹² hovorí, že Pauliho nazývali „svedomím fyziky“. Bol veľmi zdielny a svojimi námetmi podnietil veľa objavov. Ale nešetril ani kritikou. Ako verný Bohrov priateľ a poradca mnohým prispel ku „kodanskému duchu“. Weisskopf píše o tom, ako ho spočiatku nekonvenčné spôsoby a „humoristické vložky“ v Kodani privádzali do rozpakov. Bohr k tomu podal takéto vysvetlenie: „Existujú veci, ktoré sú také vážne, že možno o nich iba žartovať“.

S prelomom vo fyzike dvadsiateho storočia zmenili sa aj vzájomné ľudské vzťahy medzi fyzikmi – rovesníkmi a často aj medzi učiteľmi a žiakmi.

Škrobené titulovanie (Felix Klein sa urazil, keď ho dakto oslovil pán profesor namiesto pán tajný radca), vytríbené knižné formulácie aj v bežnej reči, zachovávanie dekóra v každej situácii, nahradilo celkom „civilné“ obliekanie a správanie sa vedcov, búrlivé otvorené diskusie korenené humorom a často aj iróniou. Druhou stránkou tejto mince bola nezištná spolupráca, vzájomné úsilie dosiahnuť jasno a čisté vzťahy vo vede a v ľudskom snažení. Wolfgang Pauli bol významným nositeľom tohto ducha.

George Eugene Uhlenbeck sa narodil 6. decembra 1900 v Batávii (teraz Djakarta) na Jáve (Indonézia). V roku 1927 dokončil štúdiá v Leidene v Holandsku a odišiel do Spojených štátov amerických, kde prednášal na Michiganskej univerzite. V rokoch 1935–1939 bol profesorom teoretickej fyziky v staro-bylom Utrechte v Holandsku, potom sa vrátil do USA, kde bol profesorom na Michiganskej a Rockefellerovej univerzite.

S menami Uhlenbecka a Goudsmita sa vo fyzike spája zavedenie spinu elektrónu. História je v skutočnosti trochu zamotaná. Ako sme už uviedli, bol to Wolfgang Pauli, ktorý ešte pred vznikom kvantovej mechaniky upozornil na to, že štvrté kvantové číslo musí súvisieť s akousi dvojznačnosťou samotného elektrónu. Pauli oboznámil so svojimi myšlienkami Alfréda Landého¹¹³ ešte pred uverejnením svojho článku v liste z 24. novembra 1924. Tento list sa dostal do rúk dvadsaťročnému holandskému štipendistovi Columbijskej univerzity Kronigovi¹¹⁴, ktorého inšpiroval k vypracovaniu novej teórie zdvojenia niektorých spektrálnych čiar, napríklad žltej čiary sodíka. Rozštiepenie spektrálnej čiary pri prechodoch jedenásteho optického elektrónu sodíka vysvetľovali fyzici vzájomným pôsobením dráhového (orbitálneho) momentu hybnosti optického elektrónu a momentu hybnosti zvyšku atómu (t. j. jadra a desiatich vnútorných elektrónov). Výpočty boli však v rozpore s experimentálnymi hodnotami, čo sa vtedy považovalo za vážnu námietku proti Bohrovej teórii.

Kronig našiel iné vysvetlenie rozštiepenia spektrálnych čiar: Podľa neho elektrón vykonáva v atóme dva pohyby, podobne ako planéta v Slnčnej sústave vykonáva ročný pohyb po orbite a denný pohyb okolo svojej osi. Keďže elektrón je nabitá častica, jeho orbitálny pohyb vyvolá vznik magnetického momentu a pohyb elektrónu okolo svojej osi zasa druhý magnetický moment. Vzájomné pôsobenie týchto dvoch magnetických momentov predstavuje dodatkovú silu k elektrostatickej sile, ktorú vyvoláva jadro a zvyšné „vnútorné“ elektróny. Tým sa trochu pozmení energia optického elektrónu. Pauliho „dvojznačnosť elektrónu“ charakterizovaná štvrtým kvantovým číslom (ktoré mohlo nadobúdať iba dve hodnoty) v tomto modeli predstavovala iba dve možné orientácie vlastného mechanického a magnetického momentu elektrónu. Tým sa vysvetľovalo zdvojenie spektrálnej čiary aj bez pôsobenia vonkajšieho magnetického poľa. Zapnutím vonkajšieho magnetického poľa vzniká oveľa komplikovanejšie rozštiepenie spektrálnej čiary sodíka (anomálny Zeemanov efekt), ktorý tiež Kronigova teória vysvetlila.

¹¹¹ Jeden z vydavateľov Pauliho vedeckej korešpondencie, Springer, New York, Heidelberg, Berlin 1979.

¹¹² Victor Frederic Weisskopf narodil sa 19. septembra 1908 vo Viedni. Významný teoretický fyzik, od roku 1937 pôsobil v USA, s výnimkou rokov 1960–1965, keď bol riaditeľom CERN-u v Ženeve (CERN je skratkou pre Európsky Ústav Jadrového Výskumu). Niektoré jeho myšlienky sme reprodukovali v čl. 5.1.1.

¹¹³ Alfréd Landé (1888–1975) bol v rokoch 1922–1931 profesorom fyziky v Tübingene.

¹¹⁴ Ralph de Laer Kronig sa narodil 10. marca 1904 v Dráždanoch. Po skončení štúdia v USA pôsobil v holandskom Groningene a v Delfte. V tridsiatych rokoch vypracoval kvalitatívnu teóriu pohybu elektrónov v kryštáloch tuhej látky pomocou kvantovomechanického modelu pravouhlých potenciálových jám.

Kronig sa stretol s Paulim začiatkom januára 1925 v Tübingene a predložil mu svoju teóriu. Pauli túto hypotézu zavrhol okrem iného preto, že výsledný Kronigov vzťah sa odlišoval od nameraných hodnôt faktorom 2, ktorý sa nedal vysvetliť. Až o rok sa ukázalo, že išlo o výpočtovú chybu. So zreteľom na námietky prísneho kritika Pauliho Kronig svoju teóriu nepublikoval.

Dvaja iní poslucháči fyziky navštívili s tým istým nápadom iného významného teoretického fyzika. Hrdinami druhej epizódy boli Uhlenbeck, Goudsmit a profesor teoretickej fyziky v Leidene Paul Ehrenfest¹¹⁵. Uhlenbeck a Goudsmit vyslovili Ehrenfestovi aj svoje pochybnosti. Zistili totiž, že obvodová rýchlosť elektrónu, otáčajúceho sa okolo vlastnej osi, by musela viacnásobne prekročiť rýchlosť svetla, čo je v rozpore s Einsteinovým princípom hraničnej rýchlosti svetla, na ktorom spočíva špeciálna teória relativity. Ehrenfest na to odpovedal, že to je buď veľmi dôležité, alebo nezmysel, ale povzbudil ich, aby svoju prácu uverejnili. Študenti napísanú prácu odovzdali Ehrenfestovi, ale po konzultácii s A. H. Lorentzom si to predsa rozmysleli. Uhlenbeck o tom v roku 1955 rozprával: „S Goudsmitom sme uvážili, že by vari bolo lepšie predsa len stiahnuť publikáciu“. Ehrenfest nám odvetil: „Už dávno som odoslal Váš článok do tlače. Vy ste obaja dosť mladí na to, aby ste si mohli dovoliť urobiť hlúposť!“ Tak sa objavil v časopise *Naturwissenschaften* článok signovaný 17. októbra 1925: „G. E. Uhlenbeck a S. A. Goudsmit: *Nahradenie hypotézy nemechanického donútenia požiadavkou, týkajúcou sa vnútorného správania sa jednotlivých elektrónov*.“

Teória spinu elektrónu sa zrodila takmer súčasne s kvantovou mechanikou – novou teóriou mikročastíc. Nečudo, že ani klasická interpretácia spinu ako vrtiaceho sa elektrónu nemala dlhé trvanie. Jednou z príčin tejto historickej skutočnosti je aj rozpor klasického obrazu vrtiaceho sa elektrónu s teóriou relativity, ktorú pôvodcovia spinu sami objavili. Spin bol do kvantovej mechaniky veľmi skoro zabudovaný celkom prirodzeným spôsobom samotným Paulim. Skutočne podrobné vysvetlenie spinu prišlo s relativistickou Diracovou rovnicou.

Samuel Abraham Goudsmit sa narodil 11. júla 1902 v Haagu v obchodníckej rodine. Študoval spolu s Uhlenbeckom na Univerzite v Leidene, kde promoval v roku 1927. Spolu publikovali článok o spine. Tak ako Uhlenbeck, aj Goudsmit odišiel v roku 1927 do USA a pracoval na Michiganskej univerzite. Do roku 1944 potom pracoval na Massachusetts Institute of Technology. Vybrali ho za spoluviteľa americkej vojenskej výzvednej skupiny Alsos, ktorá mala po invázii amerických vojsk na európskom kontinente vyskúmať stav nemeckého atómového projektu.

Publicista Robert Jungk¹¹⁶ takto charakterizuje Goudsmita: „Strýko Sam, ako sa Goudsmitovi hovorilo v rodine fyzikov, sa vôbec nezamerikanizoval, hoci žil v USA od r. 1927. Nad ostatnými fyzikmi vynikal veselosťou a mnohostrannosťou. Okrem toho, že sa vášnivo zaujímal o kriminalistiku, bol vynikajúcim egyptológom, zberateľom skarabeov, skvelým rozprávačom a predovšetkým dobrosrdečným a skromným človekom, ktorého žiaci uctievali a priatelia milovali.“

Goudsmit, ktorý s jednotkou Alsos postupoval za prvosledovými jednotkami, mal za úlohu vypátrať nemeckých atómových vedcov a zaistiť ich. To sa mu podarilo 22. apríla 1945 v zapadnutej alpskej obci Heigerlach pri Hechingene, kam skupina Alsos dorazila pred francúzskou okupačnou armádou. Napokon internovali vo Farm Hall v Anglicku desiatich vedcov, medzi nimi aj Heisenberga. Goudsmit ich osobne vypočúval. Mal pritom so sebou fotografiu z roku 1939, na ktorej si s Heisenbergom priateľsky potriasajú ruky. Heisenberg vtedy (v r. 1939) nasadol na poslednú loď, ktorá sa ešte plavila z USA do Nemecka. Po skončení vojny sa Goudsmit vrátil do USA. Od r. 1948 pracoval v Brookhaven National Laboratory v USA. Zomrel 4. decembra 1978 v Rene (Nevada, USA).

¹¹⁵ Paul Ehrenfest sa narodil 18. januára 1880 vo Viedni. V rokoch 1907–1912 pôsobil v Sankt-Peterburgu (terajšom Leningrade), potom bol profesorom v Leidene až do svojej dobrovoľnej smrti 25. septembra 1933 v Amsterdame. V kvantovej mechanike sú po ňom pomenované vety, ktoré určujú vzťah medzi niektorými výsledkami kvantovej a klasickej mechaniky. Významné sú aj jeho práce v štatistickej fyzike.

¹¹⁶ JUNGK, R.: *Jasnejšie ako tisíc slnc*. Bratislava : Osveta, 1964.

7 CHEMICKÁ VÄZBA A ŠTRUKTÚRA MOLEKÚL

7.1 ÚVOD

Skoro po vzniku kvantovej mechaniky sa ukázalo, že táto nová teória je schopná vysvetliť štruktúru atómov. Základné myšlienky tohto prístupu sme už kvalitatívne prediskutovali. Bolo preto prirodzené predpokladať, že kvantová mechanika bude schopná vysvetliť aj problémy štruktúry molekúl. Atóm je totiž sústava skladajúca sa z ťažkého jadra a elektrónov pohybujúcich sa okolo jadra a navzájom interagujúcich coulombovskými silami. Molekula je komplikovanejšia len v tom, že má niekoľko jadier, ale v princípe je opis takejto sústavy rovnaký ako opis atómu. Pri molekule, podobne ako pri atóme, sa zaujímate o energiu jej kvantových stavov, o rozloženie náboja, o interakciu molekuly so žiarením atď. Z hľadiska chémie sú však najdôležitejšie tie vlastnosti, ktoré možno zhrnúť pod pojem chemickej väzby. Tieto vlastnosti vysvetľujú vytváranie molekúl z atómov, väčšiu stabilitu niektorých molekúl a menšiu stabilitu iných, geometrické vlastnosti molekúl atď.

Chemici poznajú viacero typov väzieb. Najjednoduchšími z nich sú iónová a kovalentná väzba¹¹⁷. Iónovú väzbu možno kvalitatívne objasniť aj bez podstatného využitia kvantovej mechaniky, hoci presné výpočty sa bez jej použitia nezaobídu. Kovalentná väzba je však spôsobená typicky kvantovomechanickými zákonitosťami a bez nich nie je možné tento typ väzby ani kvalitatívne pochopiť. Keď W. G. Heitler a F. London v r. 1927 vysvetlili kovalentnú väzbu v najjednoduchšom prípade – molekule H₂ – bolo to správne považované nielen za veľký úspech kvantovej mechaniky, ale aj za začiatok nového prístupu k problému štruktúry molekúl.

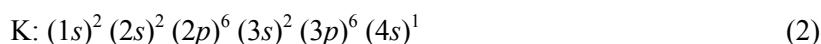
V poslednej časti úvodu sa stručne zmienime o iónovej väzbe a v niekoľkých nasledujúcich článkoch podrobnejšie opíšeme kvantovomechanické vysvetlenie kovalentnej väzby. Začneme s prípadom molekulárneho iónu H₂⁺, ktorý sa skladá z dvoch protónov a jedného elektrónu, potom prejdeme k molekule H₂. Ďalej sa budeme zaoberať tým, ako kvantová mechanika vysvetľuje priestorovú štruktúru niektorých jednoduchých molekúl ako H₂O, NH₃, a CH₄ a uvedieme niekoľko poznámok aj o zložitejších molekulách.

Iónová väzba

Najčastejšími prípadmi tejto väzby sú molekuly NaCl alebo KCl, v ktorých sa zlučuje atóm s jediným elektrónom nad úplne zaplnenými vrstvami (Na, K) s atómom, ktorému chýba jediný elektrón do zaplnenia určitej vrstvy. Skutočne, sodík (Na) má 11 elektrónov, ktoré sú rozdelené po jednotlivých stavoch podľa schémy

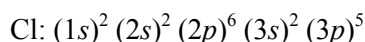


Vidíme, že stavy s $n = 1$, $n = 2$ sú plne obsadené a navyše máme jediný elektrón v stave (3s). Elektrónová konfigurácia draslíka je



Tu už treba poznamenať, že hladina (3d) je „vyššie“ ako (4s), a preto sa začína najprv obsadzovať (4s). Aj draslík má takto jeden elektrón nad zaplnenými hladinami 1s, 2s, 2p, 3s, 3p.

Atóm chlóru má nasledujúcu elektrónovú konfiguráciu



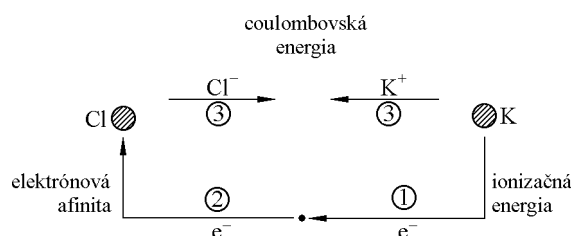
a chýba mu jediný elektrón do zaplnenia hladiny (3p).

¹¹⁷ Väčšina väzieb v reálnych molekulách je niečím medzi čisto iónovou a čisto kovalentnou väzbou, ktoré sú v istom zmysle limitnými prípadmi.

Opíšeme teraz vznik molekuly KCl spôsobom, ktorý nie je veľmi realistický, ale ukazuje jasne základné veličiny používané pri iónových väzbách. Predstavme si neutrálne atómy K a Cl vo veľkej vzdialenosti, povedzme 2 km od seba. Priestor okolo nich a medzi nimi nech je úplne prázdny. Z atómu K vyberieme elektrón v stave (4s) a preniesieme ho do stredu vzdialenosti medzi oboma atómami. Na vytrhnutie elektrónu z atómu spotrebujeme ionizačnú energiu rovnú v prípade draslíka 4,34 eV. Dostaneme tak ión K^+ , elektrón e^- a neutrálny atóm chlóru Cl. Spojením e^- s atómom Cl vznikne ión Cl^- a získame energiu 3,61 eV, ktorú nazývame elektrónovou afinitou chlóru. Dokopy sme teda spotrebovali energiu 0,73 eV. Teraz ióny K^+ a Cl^- vzájomne priblížime na vzdialenosť rovnú súčtu veľkosti ich polomerov. Každý z nich má polomer okolo $1,5 \cdot 10^{-10}$ m, takže vzdialenosť dvoch iónov bude $r \approx 3 \cdot 10^{-10}$ m. Pri približovaní iónov K^+ , Cl^- na túto vzdialenosť získame energiu $E_c = Ke^2/r$. Pretože $Ke^2 = 2,3 \cdot 10^{-28} \text{ kgm}^3 \text{ s}^{-2}$ eV = $1,6 \cdot 10^{-19}$ J, postupne máme

$$E_c = \frac{Ke^2}{r} = \frac{2,3 \cdot 10^{-28} \text{ kgm}^3 \text{ s}^{-2}}{3 \cdot 10^{-10} \text{ m}} = 0,77 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 4,8 \text{ eV}$$

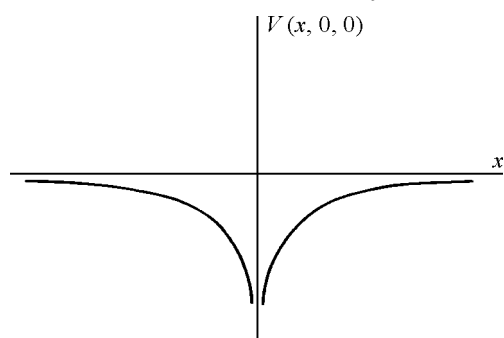
Získali sme teda energiu $4,8 \text{ eV} - 0,73 \text{ eV} \approx 4,07 \text{ eV}$. Táto energia je zrejme rozdielom medzi energiou dvoch voľných a neutrálnych atómov K, Cl a energiou molekuly KCl. Je to preto väzbová energia molekuly¹¹⁸. Schéma je ešte raz na obr. 7.1.



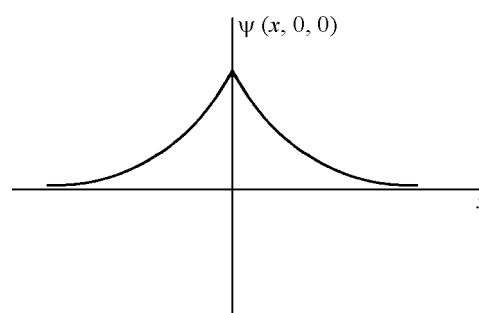
Obr. 7.1 Vznik molekuly KCl z dvoch vzdialených neutrálnych atómov. Pri kroku 1 spotrebujeme ionizačnú energiu K, pri kroku 2 získame energiu rovnú elektrónovej afinite Cl a pri kroku 3 získame coulombovskú energiu K^+Cl^-

7.2 NAJEDNODUCHŠIA MOLEKULA – IÓN H_2^+

Kovalentná chemická väzba je vytváraná dvojicou elektrónov, pričom táto dvojica je spoločná dvom atómom spojených väzbou. Mechanizmus väzby je však ešte jasnejšie vidno na prípade iónu H_2^+ . V tomto ióne molekuly vodíka sú dva protóny viazané jediným elektrónom, ktorý je spoločný obom protónom. Teraz sa budeme bližšie zaoberať vysvetlením tejto väzby podľa kvantovej mechaniky.



Obr. 7.2a Priebeh potenciálnej energie elektrónu v poli protónu umiestneného v začiatku. Potenciálna energia je sféricky symetrická, preto zakresľujeme iba jej závislosť od x pri $y = z = 0$



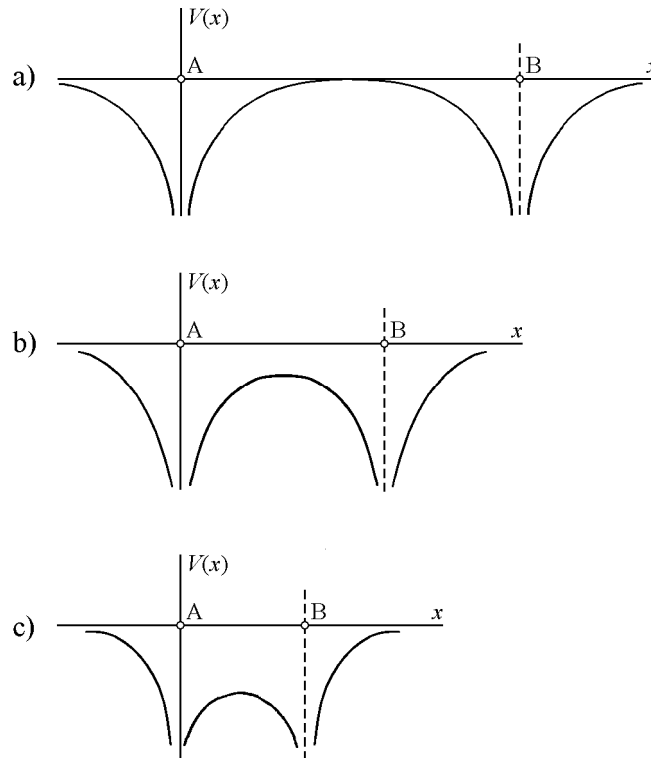
Obr. 7.2b Schéma vlnovej funkcie základného stavu atómu vodíka. Táto vlnová funkcia je sféricky symetrická a zakresľujeme preto iba jej závislosť od x pri $y = z = 0$

Na obr. 7.2a je priebeh potenciálnej energie $V(r) = -Ke^2/r$ v okolí jediného protónu nachádzajúceho sa v začiatku súradnicovej sústavy a na obr. 7.2b je príslušná vlnová funkcia základného stavu atómu

¹¹⁸ Experimentálna hodnota je 4,4 eV (rozdiel medzi odhadnutým 4,07 eV pochádza z nášho nepresného odhadu coulombovskej energie).

vodíka. Aj potenciálna energia aj vlnová funkcia sú sféricky symetrické, a preto zakresľujeme iba ich závislosť od jedinej súradnice x pri nulových hodnotách y, z .

Predstavme si teraz, že dva protóny, označíme ich A, B , sa postupne vzájomne približujú, pričom sa oba nachádzajú na osi x a ich vzájomná vzdialenosť je R . Postupnú zmenu priebehu potenciálnej energie vidno na obr. 7.3.



Obr. 7.3 Postupná zmena priebehu potenciálnej energie elektrónu v okolí dvoch protónov umiestnených v bodoch $(0, 0, 0)$ $(R, 0, 0)$. Na časti a) sú protóny vo veľkej vzdialenosti od seba. Priebeh potenciálovej energie ukazuje, že medzi obidvoma protónmi dosahuje potenciálna energia približne rovnakú výšku ako vo veľkých vzdialenostiach od jediného protónu. Na časti b) vidno, že potenciálna energia medzi protónmi sa už znižuje a na časti c) vidno podstatný pokles potenciálnej energie

Chceme teraz vedieť, ako bude vyzerat' vlnová funkcia elektrónu v základnom stave, t. j. v stave s najnižšou možnou energiou pre elektrón v poli s potenciálnou energiou, ktorú vidno na obr. 7.3. V prípade na obr. 7.3a výsledok ľahko uhádneme. Fyzikálne totiž situácia odpovedá dvom protónom vo veľkej vzdialenosti a elektrón „dodaný“ do takejto situácie sa priviaže k jednému alebo k druhému jadrú. Dostávame tak buď atóm vodíka so stredom v bode A a protón v bode B , alebo atóm vodíka v bode B a samotný protón v bode A . Vlnová funkcia má potom tvar ako na obr. 7.2b, pričom jej stred je buď v bode A , alebo v bode B . Ak je elektrón povedzme v okolí bodu A , potom je veľmi nepravdepodobné, že by mohol preskočiť k bodu B a naopak.

Ak sú protóny bližšie pri sebe, tak ako na obr. 7.3b alebo 7.3c, situácia je iná. Elektrón môže prechádzať z okolia protónu A k protónu B a naopak, a vlnová funkcia sa roztiahne na celú oblasť. Takéto „roztiahnutie sa“ vlnovej funkcie znižuje energiu sústavy z dvoch dôvodov:

– Z analýzy elektrónu viazaného na úsečku alebo na kocku vieme, že energia základného stavu sa znižuje, ak zväčšujeme oblasť, v ktorej sa elektrón môže nachádzať. Napríklad pre elektrón viazaný na úsečku s dĺžkou L je energia základného stavu daná výrazom

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

a s rastúcim L energia klesá. V prípadoch na obr. 7.3b a 7.3c je situácia komplikovanejšia, lebo potenciálna energia závisí od súradníc, ale efekt je aj tak prítomný a znižuje energiu.

– Ak je vlnová funkcia dosť veľká v oblasti medzi dvoma protónmi, znamená to, že elektrón sa vyskytuje v tejto oblasti s veľkou pravdepodobnosťou¹¹⁹ a tíni elektrostatické odpudzovanie dvoch protónov.

Presný tvar vlnovej funkcie v prípadoch z obr. 7.3b a 7.3c dostaneme len riešením rovníc kvantovej mechaniky. Približný tvar ale možno uhádnuť. Označme symbolom $\psi_A(\mathbf{r})$ vlnovú funkciu základného stavu atómu vodíka pri protóne umiestnenom v začiatku a symbolom $\psi_B(\mathbf{r})$ vlnovú funkciu atómu vodíka so stredom v bode B . Vlnová funkcia elektrónu v ióne H_2^+ nech je $\Phi(\mathbf{r})$. Ak je elektrón v okolí bodu A , na obr. 7.3b potom najsilnejší vplyv má naň tá oblasť potenciálu, ktorá „ani nevie“ o tom, že nejaký ďalší protón je v bode B . Preto platí¹²⁰

$$\Phi(\mathbf{r}) \approx C_1 \psi_A(\mathbf{r}) \quad \text{pre } \mathbf{r} \approx \mathbf{r}_A = (0, 0, 0) \quad (3)$$

a celkom analogicky

$$\Phi(\mathbf{r}) \approx C_2 \psi_B(\mathbf{r}) \quad \text{pre } \mathbf{r} \approx \mathbf{r}_B = (R, 0, 0)$$

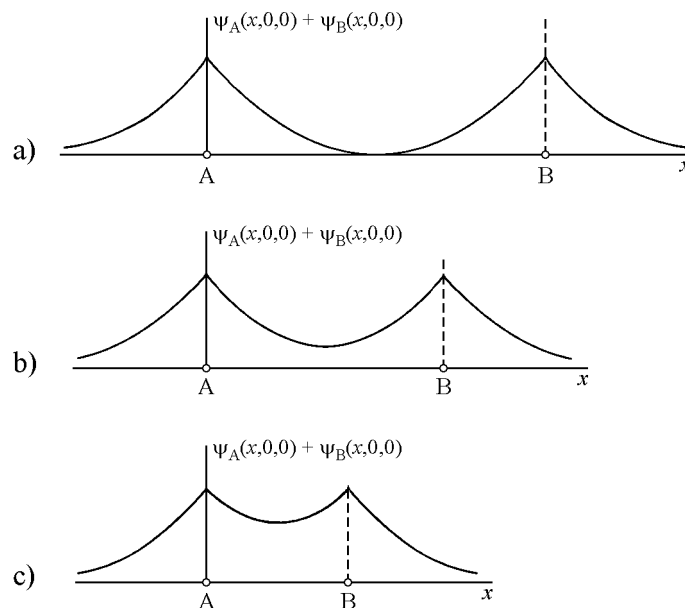
Na približný opis vlnovej funkcie v celej oblasti, teda aj uprostred vzdialenosti medzi oboma protónmi, môžeme skúsiť použiť vlnovú funkciu

$$\Phi(\mathbf{r}) \approx C_1 \psi_A(\mathbf{r}) + C_2 \psi_B(\mathbf{r}) \quad \text{pre } \mathbf{r} \approx \mathbf{r}_A = (0, 0, 0) \quad (4)$$

Ostáva nám uhádnuť ešte pomer¹²¹ C_1/C_2 . Už sme hovorili o tom, že očakávame, že vlnová funkcia by mala byť veľká v strede spojnice oboch protónov. Tam ale platí $\psi_A(\mathbf{r}_{\text{stred}}) = \psi_B(\mathbf{r}_{\text{stred}})$ a ukazuje sa, že súčet oboch členov v (4) bude najväčší, ak $C_1/C_2 = 1$. Takto máme pre vlnovú funkciu elektrónu v H_2^+ približné vyjadrenie

$$\Phi(\mathbf{r}) \equiv \Phi_S(\mathbf{r}) = C[\psi_A(\mathbf{r}) + \psi_B(\mathbf{r})] \quad (5)$$

Priebeh týchto vlnových funkcií pre situáciu z obr. 7.3 vidno na obr. 7.4a, b, c.



Obr. 7.4 Tvar vlnovej funkcie $\psi_A(x, 0, 0) + \psi_B(x, 0, 0)$ pri danej vzdialenosti protónov: a) dva protóny sú vo vzdialenosti väčšej ako Bohrov polomer a_1 udávajúci rozmer oblasti, v ktorej je vlnová funkcia veľká. b), c) vzdialenosť protónov je porovnateľná s rozmermi vlnovej funkcie

¹¹⁹ Podrobnejšie zdôvodnenie tohto tvrdenia vyplýva z pravdepodobnostnej interpretácie vlnovej funkcie. S ňou sa stretneme v nasledujúcej kapitole.

¹²⁰ Protóny sú v bodoch \mathbf{r}_A a \mathbf{r}_B

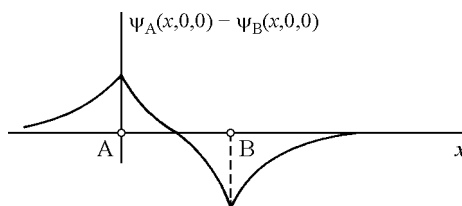
¹²¹ Ak totiž uhádneme pomer $C_1/C_2 = k$, vieme, že $C_1 = C_2 k$, $C_2 = C$ a pre vlnovú funkciu máme $\Phi(\mathbf{r}) = C[k\psi_A(\mathbf{r}) + \psi_B(\mathbf{r})]$, kde C je konštanta. Pre symetrickú funkciu $\Phi(\mathbf{r})$ vyberáme $k=1$. Konštanta C neovplyvňuje tvar vlnovej funkcie a veľkosť $|C|^2$ je určená normovacou podmienkou vyplývajúcou z pravdepodobnostnej interpretácie vlnovej funkcie. O tejto interpretácii budeme hovoriť v nasledujúcej kapitole.

V prípadoch b), c) vidíme, že vlnová funkcia je skutočne v oblasti medzi protónmi veľká, teda tak ako sme očakávali¹²².

Ako druhý príklad by sme mohli skúsiť lineárnu kombináciu [$\psi_A(\mathbf{r})$ a $\psi_B(\mathbf{r})$] odpovedajúcu pomeru $C_1/C_2 = -1$. Vtedy¹²³ máme

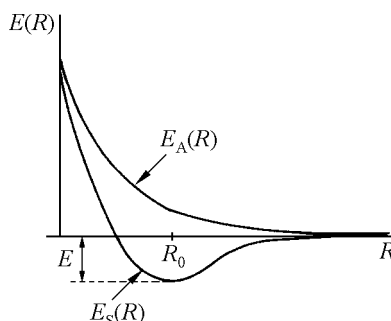
$$\Phi(\mathbf{r}) \equiv \Phi_A(\mathbf{r}) = C[\psi_A(\mathbf{r}) - \psi_B(\mathbf{r})] \quad (6)$$

a takáto vlnová funkcia je na obr. 7.5. Z obrázku hneď vidno, že vlnová funkcia sa mení so zmenou x rýchlejšie ako vlnová funkcia daná rovnicou (5) a navyše $|\Phi_A(\mathbf{r})| \approx 0$ v strede úsečky spájajúcej protóny A, B. Rýchlejšia zmena vlnovej funkcie naznačuje vyššiu kinetickú energiu a malá hodnota vlnovej funkcie v strede medzi obidvoma protónmi naznačuje vyššiu hodnotu potenciálnej energie. Očakávame teda, že stavy typu Φ_S budú mať celkovú energiu nižšiu ako stavy typu Φ_A .



Obr. 7.5 Vlnová funkcia $\psi_A(\mathbf{r}) - \psi_B(\mathbf{r})$ pre elektrón v molekule H_2^+

Pri výpočte štruktúry iónu H_2^+ sa postupuje tak, že pri danej vzdialenosti R dvoch protónov nájdeme vlnovú funkciu, ktorá odpovedá najnižšej celkovej energii. Pri vlnovej funkcii $\Phi_S(\mathbf{r})$ označíme výsledok ako $E_S(R)$ a pri vlnovej funkcii $\Phi_A(\mathbf{r})$ ako $E_A(R)$. Takto získané priebehy energií $E_S(R)$ a $E_A(R)$ vidno na obr.7.6. Energia je pritom zavedená tak, že nulová energia odpovedá atómu vodíka vo veľkej vzdialenosti od protónu. Na krivke $E_S(R)$ vidno minimum pri istej hodnote R_0 vzdialenosti dvoch protónov. Energia pri tejto vzdialenosti $E_S(R_0)$ je záporná.



Obr. 7.6 Kvalitatívny priebeh energie sústavy protón + protón + elektrón v závislosti od vzdialenosti R dvoch protónov. $E_S(R)$ a $E_A(R)$ zodpovedajú vlnovým funkciám $\Phi_S(\mathbf{r})$ a $\Phi_A(\mathbf{r})$. Nulová hodnota energie zodpovedá energii protónu vo veľkej vzdialenosti od atómu vodíka

Energia iónu H_2^+ je pri tejto vzdialenosti minimálna a menšia ako energia oddeleného atómu vodíka a protónu. Výpočet preto ukazuje, že existuje stabilná konfigurácia iónu H_2^+ a $|E_S(R_0)|$ je väzbová energia iónu. Experimentálna hodnota väzbovej energie je 2,65 eV a vzdialenosť medzi protónmi v tomto stave je $R_0 = 2a_1$, kde a_1 je Bohrov polomer atómu vodíka. Presné výpočty dávajú skutočne tieto hodnoty, ale už aj približný výpočet založený na vlnových funkciách typu (5) dáva hodnoty s presnosťou okolo 25 %.

¹²² Okamžite vidno, že vlnová funkcia $\Phi_S(\mathbf{r})$ je veľká uprostred oboch protónov len vtedy, ak sú tu veľké obe funkcie $\psi_A(\mathbf{r})$, $\psi_B(\mathbf{r})$ a to znamená, že je veľké aj ich prekrytie. Práve veľkosť prekrytia vlnových funkcií elektrónov pri dvoch susedných atómoch sa často považuje za kritérium pre možný vznik chemickej väzby

¹²³ Funkcia $\Phi_S(\mathbf{r})$ je symetrická a funkcia $\Phi_A(\mathbf{r})$ antisymetrická voči bodu $\mathbf{r}_{\text{stred}} = (\mathbf{r}_A + \mathbf{r}_B)/2$. V učebniciach kvantovej mechaniky sa ukazuje, že v úlohách so symetrickou potenciálnou energiou sú vlnové funkcie zodpovedajúce diskretným kvantovým stavom spravidla symetrické alebo antisymetrické. Podrobnejšie sa tu s touto otázkou nebudeme zaoberať.

Vlnovú funkciu elektrónu v molekule nazývame molekulárnym orbitalom. V rovnicach (5) a (6) sú *molekulárne orbitály* (chemici ich označujú skrátene MO) zapísané ako lineárne kombinácie atómových orbitalov, t. j. vlnových funkcií elektrónov v izolovaných atómoch (chemici označujú toto priblíženie skratkou LCAO – z angl. Linear Combination of Atomic Orbitals).

7.3 MOLEKULA VODÍKA H₂

Štruktúru tejto najjednoduchšej molekuly prvýkrát spočítali v rámci kvantovej mechaniky London a Heitler v r. 1927. Kvalitatívny súhlas ich približných výpočtov s experimentálne určenou väzbovou energiou a rozmerom molekuly presvedčivo ukázal, že kvantová mechanika je aj teoretickým základom štruktúry a vlastností molekúl (experimentálna hodnota väzbovej energie je 4,72 eV a vzdialenosť jadier atómov vodíka je $0,74 \cdot 10^{-10}$ m).

Potom, čo sme v predchádzajúcom článku prediskutovali ión H₂⁺, vieme si už predstaviť, ako bude vyzeráť molekula H. Pauliho princíp totiž dovoľuje pridať ďalší elektrón do iónu H₂⁺ do stavu $\Phi_S(\mathbf{r})$, čím dostaneme molekulu H₂. Obidva elektróny musia mať ale „opačne orientované“ spiny. Výpočty sa trochu komplikujú tým, že treba zarátať aj elektrostatické odpudzovanie elektrónov. Väzbová energia bude preto o niečo menšia než dvojnásobok väzbovej energie iónu H₂⁺. Presné numerické výsledky získané pomocou počítačov ukazujú úplný súhlas teórie a experimentu.

7.4 JEDNODUCHÝ MODEL ŠTRUKTÚRY MOLEKÚL VODY A ČPAVKU

Kvantová mechanika vysvetľuje tiež štruktúru molekuly vody a s ňou aj jej fyzikálne a chemické vlastnosti. Podrobné výpočty sú tu veľmi komplikované, ale o tie sa nebudeme zaujímať. Vynasnažíme sa pochopiť štruktúru molekuly vody iba na kvalitatívnej úrovni. V molekule H₂O, ako chemici dobre vedia, sú obidva vodíky viazané rovnako silne. Väzba je v podstate kovalentná a je daná dvojicami elektrónov zdieľanými každým z atómov H a atómom kyslíka. Vlnová funkcia elektrónu v atóme H je sféricky symetrická a neovplyvňuje smerové vlastnosti väzby v molekule H₂O. Pozrime sa preto podrobnejšie na elektrónovú konfiguráciu atómu kyslíka. Kyslík má 8 elektrónov rozdelených podľa schémy, na ktorú sme si už zvykli, takto

$$\text{atóm O: } (1s)^2 (2s)^2 (2p)^4 \quad (7)$$

Podľa predchádzajúcej kapitoly vieme, že existujú tri stavy 2p odlišujúce sa hodnotami m , $m = -1, 0, 1$. Ak sa ale pozrieme na nákresy príslušných vlnových funkcií, vidíme, že funkcie s $m = \pm 1$ a $m = 0$ majú podstatne odlišný tvar. Vlnová funkcia odpovedajúca stavu 2p, $m = 0$ pripomína činku s krátkou rúčkou v smere osi z, kým funkcie s $m = \pm 1$ pripomínajú prstence s malým vnútorným polomerom obtočené okolo osi z.

Pri diskusii iónu H₂⁺ sme si všimli, že pre vytvorenie kovalentnej väzby je podstatný prekryv vlnových funkcií elektrónov príslušných k dvom rôznym atómom (len vtedy môže vzniknúť molekulárny orbital spojený s obidvoma atómami). Na takéto prekrytia s atómom vodíka je najlepšie vystrojený atomárny orbital kyslíka 2p s $m = 0$, ktorý je opísaný „činkou“ ležiacou v smere osi z. Na tento orbital bude teda priviazaný jeden atóm vodíka. Potom by ale druhý atóm vodíka musel byť priviazaný na „prstencový“ orbital s $m = 1$ alebo s $m = -1$. To by ale znamenalo, že oba vodíky sú viazané rôznym spôsobom, čo protirečí experimentálnym údajom. V predchádzajúcej úvahe bola preto zrejme niekde chyba, a treba sa vrátiť na začiatok.

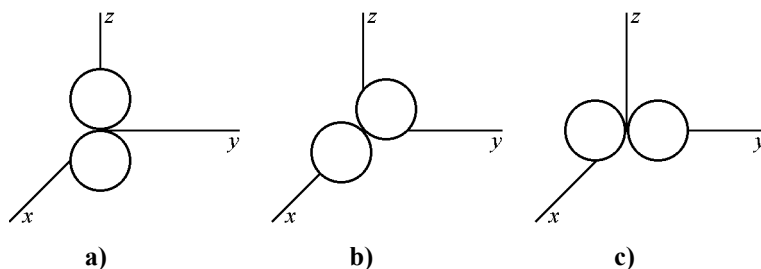
Kľúč na riešenie problému je v degenerácii stavov 2p. Všetky tri vlnové funkcie (indexy označujú kvantové čísla n, l, m)

$$\psi_{2,1,1}(\mathbf{r}), \quad \psi_{2,1,0}(\mathbf{r}), \quad \psi_{2,1,-1}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

zodpovedajú rovnakej energii. V súvislosti s elektrónom viazaným v kocke sme už hovorili o tom, že za tri nezávislé vlnové funkcie môžeme vziať aj lineárne kombinácie funkcií (8). Ekvivalentnosť väzieb vodíka v H₂O naznačuje, že tieto lineárne kombinácie by mali byť vybrané tak, aby nové funkcie mali rovnaký tvar a odlišovali sa len orientáciou v priestore. Ukazuje sa, že príslušné kombinácie sú týmto určené prakticky jednoznačne:

$$\begin{aligned}\psi_{2p_z} &\equiv \psi_{2,1,0} \\ \psi_{2p_x} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(-\psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1}) \\ \psi_{2p_y} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1})\end{aligned}\tag{9}$$

Tieto tri vlnové funkcie majú naozaj rovnaký tvar: sú to zas „činky“ orientované postupne v smere osí z , x , y . Ich tvar je schematicky znázornený na obr. 7.7.

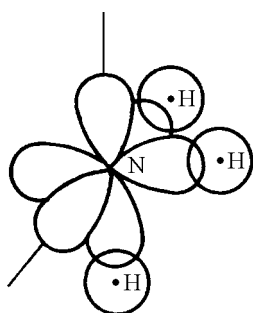


Obr. 7.7 Schéma atómových orbitalov a) $2p_z$ b) $2p_x$ c) $2p_y$. V útware („činke“) na obrázku je absolútna hodnota vlnovej funkcie „veľká“, mimo neho je „malá“

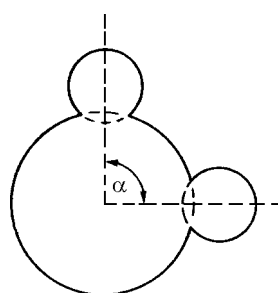
Konfiguráciu elektrónov v atóme kyslíka zadáme teraz tak, že udáme počet elektrónov v jednotlivých kvantových stavoch. Najjednoduchšie je zadávať toto rozdelenie pomocou tabuľky,

1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$	
↑↓	↑↓	↓↑	↑	↑	(10)

ktorá hovorí, že v stave 1s máme dva elektróny s opačne orientovanými spinmi, takisto je obsadený stav 2s a stav $2p_x$. Elektróny, ktoré vytvárajú väzbu, budú pri tejto konfigurácii $2p_y$ a $2p_z$. Z predchádzajúceho ale vyplýva, že uhol medzi „činkami“ je 90° a ak sa na orbitály naviažu atómy, dostaneme štruktúru molekuly vody, ktorú vidíme na obr. 7.8a. Jednoduchá úvaha nás priviedla k tomu, že uhol medzi spojnicami z jadra kyslíka k dvom jadrom vodíka je 90° . Úvaha ale zanedbáva niektoré skutočnosti, napr. elektrostatické odpudzovanie sa dvoch jadier atómov vodíka. V skutočnosti je uhol naznačený na obr. 7.8 väčší, je rovný zhruba $104,5^\circ$.



Obr. 7.8a Schéma vzniku molekuly H_2O . Z atómu kyslíka sme naznačili iba orbitály $2p_y$, $2p_z$ a orbitály vodíka, ktoré spolu s elektrónmi $2p_y$, $2p_z$ vytvárajú väzby

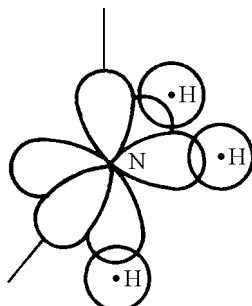


Obr. 7.8b Pohľad zhora na molekulu H_2O , predpovedaný jednoduchou úvahou v texte. V skutočnosti sa uhol α rovná nie 90° , ale zhruba $104,5^\circ$

Podobne jednoduché je aj kvalitatívne vysvetlenie geomergickej štruktúry molekuly čpavku NH_3 . Elektrónová konfigurácia atómu dusíka je daná podľa nasledujúcej tabuľky

atóm N (7 elektrónov)	1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$	
	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	(11)

Atómy vodíka sa priviažu na tri $2p$ orbitály dusíka. Tieto tri $2p_x, 2p_y, 2p_z$ orbitály majú smer osí x, y, z a jednoduchý obraz molekuly NH_3 , ktorý takto dostávame, je na obr. 7.9. Uhly medzi smermi jednotlivých väzieb sú takto 90° . V skutočnosti sú uhly väčšie, sú rovné $107,5^\circ$. Odchýlku možno kvalitatívne vysvetliť elektrostatickým odpudzovaním sa jadier atómov vodíka. Hlbšie vysvetlenie je ale v tom, že v atóme dusíka vznikajú hybridizované orbitály, na ktorých sa zúčastňujú aj $2s$ elektróny v atóme dusíka. S touto otázkou sa budeme zaoberať v nasledujúcom článku.



Obr. 7.9 Jednoduchý obraz molekuly NH_3 vznikajúci pri väzbe atómov H na atómové orbitály $2p_x, 2p_y, 2p_z$ atómu dusíka

7.5 ŠTRUKTÚRA MOLEKULY METÁNU. HYBRIDIZÁCIA sp^3

Molekula metánu CH_4 sa skladá z jedného atómu uhlíka a štyroch atómov vodíka. Pritom, ako chemici dobre vedia, sú všetky štyri väzby ekvivalentné a teda aj rovnako silné. Pretože veľkosť väzby závisí od veľkosti prekrytia, musí mať atóm uhlíka pri väzbe štyri atómové orbitály odlišujúce sa iba smerom. Uhlík má 6 elektrónov a ich konfigurácia v základnom stave je

atóm C	$1s$	$2s$	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$	
	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow		(12)

Podľa tejto konfigurácie by sa zdalo, že uhlík môže byť iba dvojmocný (ako často aj býva).

Rozdiel energií medzi stavmi $2p$ a $2s$ je ale dosť malý (v čisto coulombovskom poli majú tieto stavy rovnakú energiu), a preto môže byť pre atóm uhlíka v molekule užitočné „presunúť“ jeden $2s$ elektrón do stavu $2p$. Energiu, ktorú tu atóm „prerába“, môže ale zarobiť na väzbovej energii, ak je väzbová energia v molekule s „prehodeným“ elektrónom dostatočne veľká. Takáto konfigurácia atómu uhlíka je

excitovaný atóm C	$1s$	$2s$	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$	
	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	(13)

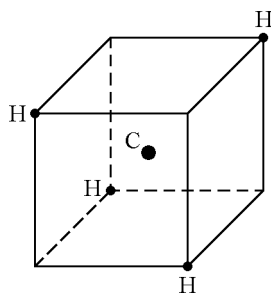
V takomto stave môže byť uhlík štvormocný, tak ako to potrebujeme na vysvetlenie štruktúry molekuly CH_4 . Pri elektrónovej konfigurácii (13) by sme ale nemali v metáne štyri rovnaké väzby s atómami H, lebo orbital $2s$ má iný tvar ako orbitály $2p$.

Vysvetlenie spočíva zasa v tom, že orbitály s približne rovnakou energiou môžu vytvárať lineárne kombinácie. V našom prípade teda potrebujeme štyri kombinácie

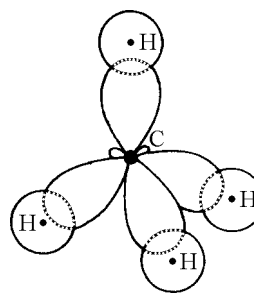
$$\Phi_i = \alpha_{i1}\psi_{2s} + \alpha_{i2}\psi_{2p_x} + \alpha_{i3}\psi_{2p_y} + \alpha_{i4}\psi_{2p_z} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (14)$$

pričom koeficienty α_{ij} musia byť vybrané tak, aby štyri vznikajúce funkcie Φ_i mali rovnaký „geometrický tvar“ a odlišovali sa len orientáciou v priestore. Táto podmienka určuje prakticky jednoznačne tvar orbitalov aj ich relatívnu polohu. Schéma geometrickej štruktúry molekuly CH_4 je na obr. 7.10. Uhol medzi väzbami je $108,5^\circ$ a nazýva sa tetraedrickým uhlom.

Názorný nákras molekuly CH_4 je na obr. 7.11, kde sú atómy uhlíka viazané na štyri hybridizované orbitály uhlíka. O hybridizácii hovoríme preto, že výsledné orbitály vznikli lineárnou kombináciou $2s$ a $2p$ stavov (teda akoby krížením rôznych druhov). So zreteľom na to, že pri lineárnych kombináciách (14) sme použili jeden s orbital a tri p orbitály, hovoríme o sp^3 hybridizácii.



Obr. 7.10 Geometrická schéma molekuly CH_4 . Atóm C je v strede kocky a štyri atómy vodíka sú v označených vrcholoch kocky



Obr. 7.11 Nákres molekuly CH_4 . Atómy vodíka sú príviazané spoločnými elektrónovými dvojicami k štyrom sp^3 hybridizovaným orbitalom atómu uhlíka

Pri molekule vody H_2O a pri molekule čpavku NH_3 sme o hybridizácii nehovorili a uhly medzi väzbami nám vychádzali 90° namiesto skutočných hodnôt $104,5^\circ$ a $107,5^\circ$. Skutočné uhly sú ale blízke tetraedrickému uhlu v CH_4 a zdá sa preto, že aj v molekulách H_2O a NH_3 dochádza k hybridizácii. Je to skutočne pravda a presnejšiu teóriu geometrickej štruktúry molekúl H_2O a NH_3 dostaneme, ak aj pri nich zoberieme do úvahy možnosť hybridizácie.

Mohlo by sa zdať, že s pojmom hybridizácie narábame príliš voľne. Raz hovoríme, že v molekulách ako NH_3 a H_2O hybridizácia nie je a potom naznačujeme, že hybridizácia by tam predsa len mala byť. Skutočnosťou však je, že základný stav molekuly je stavom s minimálnou možnou hodnotou energie. Pri výpočte tvaru a väzbovej energie určitej molekuly kvantoví chemici hľadajú také orbitály, ktoré vedú k takémuto minimu celkovej energie. Prakticky ale musia uvažovať istú triedu vlnových funkcií a z tejto triedy nájsť tú, ktorá vedie k minimu energie. Predstavy o hybridizovaných orbitaloch sú pre nich užitočným vodidlom pri výbere uvažovanej triedy možných orbitalov. Je potom celkom možné – a skutočne sa to aj stáva – že výsledok výpočtu, ktorý súhlasí s experimentálnymi údajmi, je pre molekuly H_2O a NH_3 niekde „uprostred“ medzi obrazom bez hybridizácie a obrazom s úplnou sp^3 hybridizáciou.

V prípade CH_4 je situácia jednoduchšia v tom, že nevyhnutnosť hybridizácie pochádza vlastne z toho, že všetky väzby sú ekvivalentné.

Zdôraznime ešte raz, že hybridizácie sú síce len názornou pomôckou na vysvetlenie geometrickej štruktúry molekuly, ale zároveň sú práve pre svoju názornosť výnimočne užitočné, lebo umožňujú rýchlu a kvalitatívnu orientáciu v štruktúre zložitých molekúl.

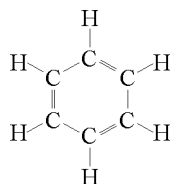
7.6 HYBRIDIZÁCIA sp^2 VO VÄZBÁCH ATÓMU UHLÍKA

Mnohé molekuly, ktoré obsahujú uhlík a vodík, sú spojené väzbou spôsobenou sp^2 hybridizáciou v atóme uhlíka. Patrí sem napríklad

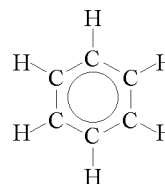
etén $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$,

butadién $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$

benzén C_6H_6



staršie znázornenie molekuly C_6H_6



novšie znázornenie molekuly C_6H_6

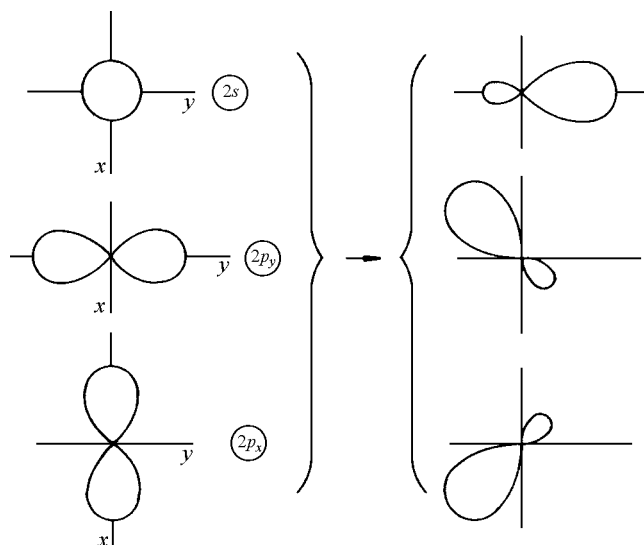
Hybridizácia v CH_2 vzniká z excitovaného stavu atómu uhlíka

1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
↑↓	↑	↑	↑	↑

hybridizácia

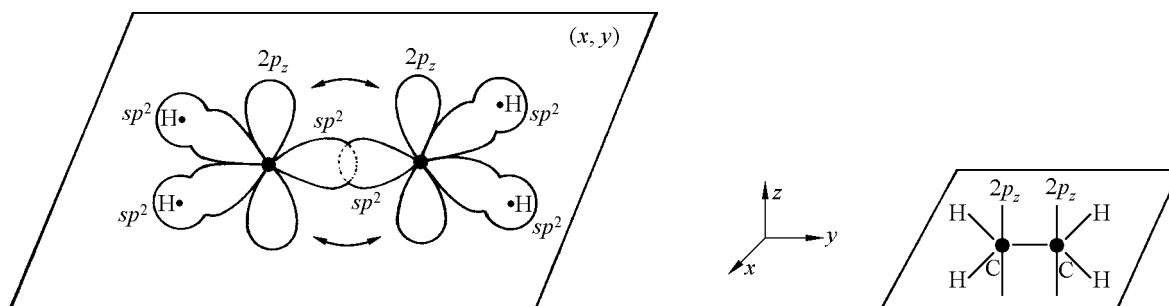
(15)

hybridizáciou troch naznačených atómových orbitalov. Hybridizáciou (lineárnymi kombináciami) vznikajú tri ekvivalentné orbitály tak, ako je to naznačené na obr. 7.12. Okrem nich máme ešte pôvodný orbitál $2p_z$, ktorý sa pri hybridizácii nezmenil.



Obr. 7.12 Z troch atómových orbitalov $2s$, $2p_x$, $2p_y$, naznačených na ľavej strane obrázku vznikajú lineárnymi kombináciami tri hybridizované sp^2 orbitály naznačené na pravej strane

Väzba v eténe je naznačené na obr. 7.13. Orbitály označené ako sp^2 ležia v rovine (x, y) orbitály $2p_z$ sú na túto rovinu kolmé. Dvojitá väzba medzi atómami uhlíka je vytvorená jednak prekrytím dvoch sp^2 orbitalov a jednak prekrytím dvoch ($2p_z$) orbitalov kolmých na rovinu (x, y) . Prekrytie orbitalov $2p_z$ je naznačené šipkami, pretože je v skutočnosti väčšie ako na obrázku.

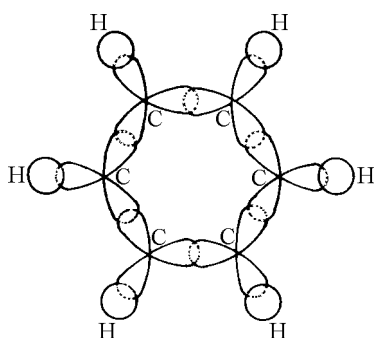


Obr. 7.13a Schéma molekuly eténu $H_2C=CH_2$. Všetky hybridizované orbitály sp^2 ležia v rovine (x, y) . Orbitály $2p_z$ majú smer kolmý na túto rovinu. V skutočnosti existuje prekryv medzi $2p_z$ orbitalmi, ktorý na obrázku nie je viditeľný. Vzdialenosť medzi atómami uhlíka (veľké guľôčky) by mala byť o čosi menšia a orbitály $2p_z$ by mali byť guľatejšie

Obr. 7.13b Schéma naznačujúca smery jednotlivých orbitalov v molekule $H_2C=CH_2$. Orbitály $2p_z$ sú kolmé na rovinu (x, y) , všetky ostatné väzby ležia v tejto rovine

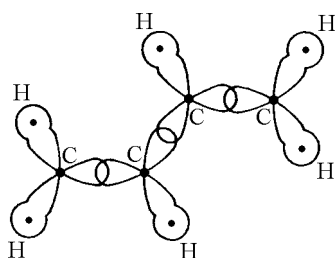
Štruktúra molekuly benzénu C_6H_6 je na obr. 7.14. Väzby sú vytvorené hybridizovanými sp^2 orbitalmi, ktoré všetky ležia v jednej rovine. Na obrázku nie sú zakreslené $2p_z$ orbitály pri každom z atómov uhlíka. Tieto si môžeme predstaviť ako „krátke činky“ s osami kolmými na rovinu molekuly. Väzba medzi atómami uhlíka vzniká jednak prekrytím sp^2 orbitalov naznačených na obrázku a jednak prekrytím $2p_z$ orbitalov, ktoré na obrázku nie sú. Väzby dané prekrytím hybridizovaných sp^2 orbitalov nazývame σ väzbami a väzby spôsobené prekrytím $2p_z$ orbitalov π väzbami.

Elektróny σ väzieb sú lokalizované na svoje miesta, kým elektróny π väzieb nie sú lokalizované a môžu „preskakovať“ z jedného atómu na druhý.

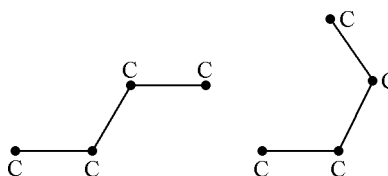


Obr. 7.14 Štruktúra molekuly benzénu. Všetkých 6 atómov uhlíka aj atómy vodíka ležia v jednej rovine. Na obrázku nie sú $2p_z$ orbitály pri každom atóme uhlíka, ktoré majú smer kolmý na rovinu molekuly

Na podobnom princípe sa zakladá štruktúra molekuly butadiénu $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$, ktorá je na obr. 7.15a. Vyznačili sme tu zas len σ väzby. Pri každom uhlíku je ešte $2p_z$ orbital, ktorý je kolmý na rovinu obrázku (totožný s rovinou molekuly). Elektróny v $2p_z$ orbitaloch sú zas delokalizované a môžu prechádzať od jedného atómu uhlíka k druhému. Sú to práve tieto elektróny, ktoré sú v istom zmysle voľné, a o ktorých sme hovorili ako o istej reálnej analógii elektrónu viazaného na úsečku (a inak voľného).



Obr. 7.15a Štruktúra molekuly butadiénu



Obr. 7.15b Dva typy molekuly butadiénu. Znázorňujeme tu iba polohy atómov uhlíka. Prvý z obrázkov zodpovedá typu molekuly z obr. 7.15a. Všetky uhly medzi väzbami sú 120°

Uhly medzi jednotlivými σ väzbami v butadiéne sú 120° . V skutočnosti existujú dva typy molekúl butadiénu. Rozdiel medzi nimi je naznačený na obr. 7.15b.

Odporúčame čitateľovi, aby porozmýšľal o štruktúre molekuly hexatriénu, ktorú sme tiež spomínali pri diskusii elektrónu viazaného na úsečku.

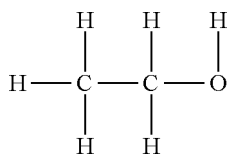
7.7 ŠTRUKTÚRA ZLOŽITEJŠÍCH ORGANICKÝCH MOLEKÚL

V tomto článku chceme len stručne poukázať na to, že princípy chemickej väzby, s ktorými sme sa už zaoberali, sa uplatňujú aj v zložitejších organických molekulách a v konečnom dôsledku sú zodpovedné aj za štruktúru molekúl živej hmoty.

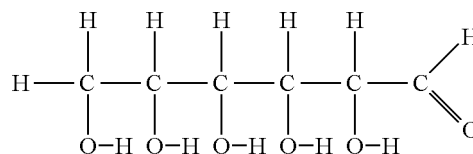
Možno sa oprávnene domnievať, že jednotný pohľad na štruktúru živej aj neživej hmoty patrí k tomu najväčšiemu, čím prispelo 20. storočie k ľudskému poznaniu.

V tomto krátkom článku sa nebudeme snažiť o nejaký podrobnejší pohľad na celú obrovskú problematiku štruktúry organických molekúl, uvedieme iba niekoľko príkladov a upozorníme na charakter väzieb, ktoré sú tu rozhodujúce.

Na obr. 7.16 je štruktúra populárnej molekuly etanolu (etylalkoholu) $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Vidíme tu dva štvorcové uhlíky – ich orbitály sú dané sp^3 hybridizáciou a dvojmocný kyslík, ktorý sa viaže dvoma orbitalmi (podobne ako v molekule H_2O) na susedné atómy uhlíka a vodíka.

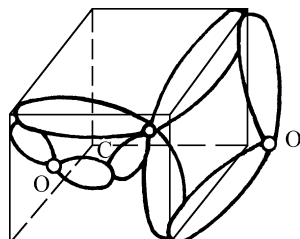


Obr. 7.16 Schéma molekuly etylalkoholu $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$



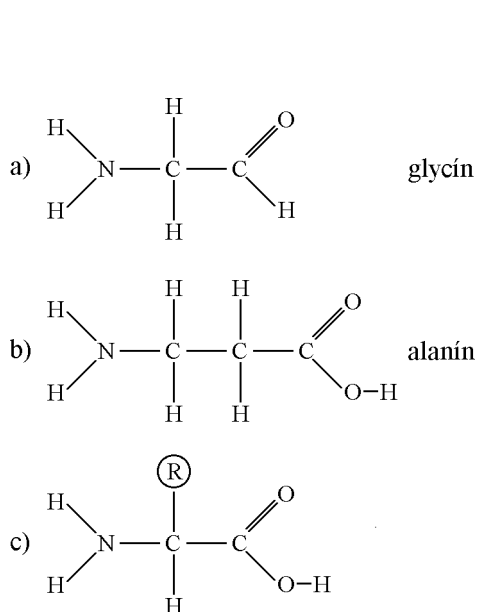
Obr. 7.17 Schéma molekuly glukózy $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$

Na obr. 7.17 je molekula glukózy $C_6H_{12}O_6$. Vidíme tu zas štvormocné uhľíky s väzbami podobnými ako v molekule metánu CH_4 , dvojmocné kyslíky s väzbou podobnou ako v molekule vody a napokon máme skupinu $-COH$ na konci molekuly. Uhlík je tu zas štvormocný, tak ako v molekule metánu a jeho väzba na predchádzajúci uhlík aj na vodík je veľmi podobná väzbe v metáne. Dvojitá väzba $C=O$ si zasluhuje trocha komentáru. Vieme, že uhľíku ešte ostali dva neviazané orbitály a kyslík má tiež dva takéto orbitály. Prekryvom dvoch kyslíkových a dvoch uhľíkových orbitalov vzniká dvojitá väzba $C=O$. Priestorovú štruktúru takejto väzby vidno najjednoduchšie na štruktúre molekuly CO_2 (obr. 7.18), ktorú by sme prehľadnejšie mohli označiť ako $O=C=O$.

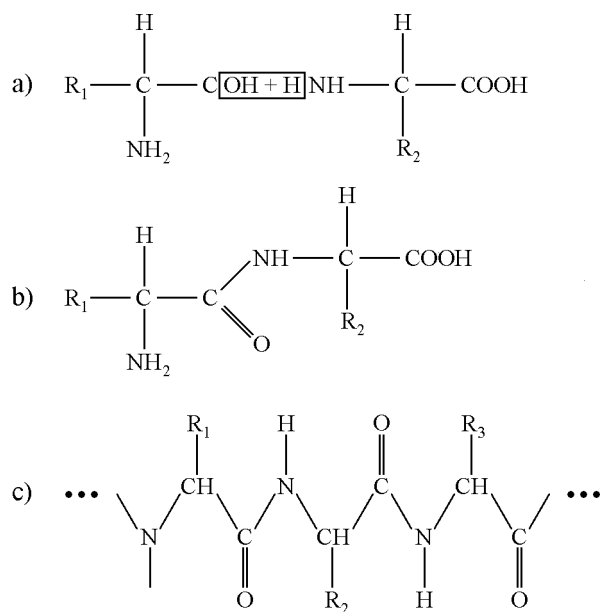


Obr. 7.18 Dvojitá väzba kyslíka s uhľíkom v molekule CO_2 . Väzbové orbitály uhľíka smerujú striedavo do rohov kocky, v ktorej strede je atóm uhľíka. Pri atómoch kyslíka kreslíme len tú časť orbitalov, ktorá sa prekrýva s orbitálmi uhľíka

Pre živú hmotu majú podstatný význam bielkoviny, ktoré sa skladajú z aminokyselín. Štruktúra niektorých aminokyselín je¹²⁴ na obr. 7.19. Pre aminokyselinu je typická aminoskupina NH_2 a karboxylová skupina $COOH$. Ak sa pozrieme na obrázky 7.19, vidíme, že so všetkými typmi väzieb, ktoré sa tu vyskytujú, sme sa už stretli.



Obr. 7.19 Schéma niektorých aminokyselín: a) glycín, b) alanín, c) všeobecná schéma niektorých aminokyselín, symbolom R je označená skupina atómov



Obr. 7.20 Schéma vzniku bielkoviny zretžaním aminokyselín. a) Dve molekuly aminokyselín. V štvorčeku sú vyznačené atómy, ktoré pri spojení aminokyselín vypadnú a vytvorí molekulu vody. Molekula, ktorá tak vznikne, je na obr. b). Spájaním ďalších molekúl aminokyselín vzniká dlhý reťazec. Princíp jeho štruktúry je naznačený v časti c)

Aminokyseliny sa spájajú do dlhých reťazcov a vytvárajú tak bielkoviny. Schéma spájania je na obr. 7.20. Väzbu medzi dvoma aminokyselinami v molekule bielkoviny nazývame *peptidickou väzbou*.

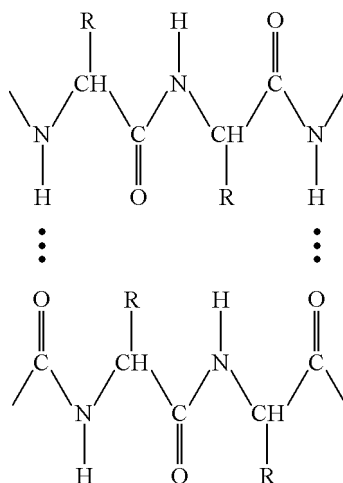
¹²⁴ Aminokyseliny v roztokoch často vystupujú ako polárne molekuly. Z karboxylovej skupiny $-COOH$ sa odštiepuje protón, čím vzniká skupina $(-COO)^-$ a k aminoskupine $-NH_2$ protón pribúda, čím vzniká $(-NH_3)^+$.

Vzniká spojením aminoskupiny —NH_2 jednej molekuly s karboxylovou skupinou druhej molekuly. Pri tomto spojení sa uvoľňuje molekula vody. Reťazce aminokyselín, podobne ako na obr. 7.20c, sa nazývajú tiež peptidickými reťazcami. Opäť si možno všimnúť, že so všetkými väzbami, ktoré sa tu vyskytujú, sme sa už stretli skôr.

V bunkách živých organizmov sa peptidické reťazce splietajú do dlhých vlákien alebo do klobiek (globulárne bielkoviny). Pre takéto splietanie sú podstatné väzby medzi peptidickými reťazcami. Za tieto väzby sú zodpovedné vodíkové mostíky, ktoré vidíme na obr. 7.21. Väzba vodíkovým mostíkom je naznačená bodkami. Trocha zjednodušený fyzikálny obraz väzieb vodíkovým mostíkom typu



je nasledujúci. Atóm vodíka na ľavej strane je viazaný s dusíkom spoločným elektrónovým párom. Vďaka tomuto sa elektrónová vlnová funkcia posúva doľava v (16) a vodík je vďaka kladnému náboju protónu nabitý kladne. Sústava N—H je teda elektrickým dipólom s kladným nábojom na vodíku a záporným na dusíku: Vo väzbe atómu kyslíka s uhlíkom na pravej strane (16) je elektrónový pár posunutý viac ku kyslíku. Je to tým, že kyslík potrebuje len dva elektróny na zaplnenie svojej $2p$ hladiny a „príťahuje“ elektróny o čosi viac ako atóm uhlíka. Preto je atóm kyslíka v (16) nabitý vcelku záporne a sústava $\text{O}=\text{C}$ pôsobí ako dipól so záporným nábojom na atóme kyslíka. Medzi obidvoma dipólmi N—H a $\text{O}=\text{C}$ existuje preto slabá príťažlivá elektrostatická interakcia, ktorá je slabšia ako kovalentná alebo iónová väzba, ale silnejšia ako van der Waalsove sily medzi neutrálnymi atómami. Vodíkové mostíky sú podstatné napríklad pre vlastnosti vody, kde sú zodpovedné za interakciu medzi jednotlivými molekulami¹²⁵.



Obr. 7.21 Schematická väzba dvoch peptidických reťazcov vodíkovými mostíkmi. Vodíkové mostíky sú naznačené bodkami

* * *

Stručný opis štruktúry niektorých organických menších aj veľkých molekúl je len malým okienkom do obrovskej oblasti známych skutočností a otvorených problémov štruktúry a vlastností živej hmoty. V tejto oblasti sa dnes stretávajú biológovia, chemici i fyzici a každý z nich prináša vlastný pohľad na problémy a vlastné metódy práce. A všetky metódy sú potrebné a nezastupiteľné¹²⁶.

¹²⁵ Kvantovomechanická teória väzby vodíkovým mostíkom je podobná s teóriou chemickej väzby v H_2^+ (pozri článok 7.2). Protón – jadro vodíka – sa nachádza v potenciálnej jame s dvomi minimami, pričom jedno minimum je v našom prípade bližšie k atómu N a druhé bližšie k atómu C. Najnižšia energia sústavy vzniká vtedy, keď vlnová funkcia protónu je superpozíciou vlnových funkcií zodpovedajúcich protónu v jednotlivých jamách.

¹²⁶ Niekedy, najmä u mladších a ešte „radikálnejšie ladených“ pracovníkov z jednej disciplíny, či už fyzikov alebo iných, vznikajú tendencie podceňovať prínos a možnosti ostatných dvoch disciplín. U fyzikov sa to prejavuje v názore, že fyzika poskytuje „základy“ a ostatné už nie je také „podstatné“. Omyl vidno z jednoduchých analógií. Napríklad je pravdou, že bez polovodičov, tranzistorov a pamäťových prvkov

7.8 ZAKLADATELIA KVANTOVEJ CHÉMIE

Walter Heinrich Heitler sa narodil 2. januára 1904 v Karlsruhe. Vyštudoval fyziku na mníchovskej univerzite a v rokoch 1927–1933 pracoval u Maxa Borna v Göttingene. V roku 1933 emigroval do Veľkej Británie, kde pôsobil do roku 1941 na univerzite v Bristole. Od roku 1941 bol profesorom na Institute for Advanced Studies v Dubline v Írsku a od r. 1949 do odchodu do dôchodku (1974) pôsobil v Zürichu. Heitler a London založili v roku 1927 kvantovú chémiu, keď použili aparát kvantovej mechaniky na približný výpočet molekuly vodíka. Heitler v roku 1929 aplikoval metódy kvantovej štatistiky na jadro dusíka a spochybnil dovtedy platnú hypotézu, podľa ktorej sa jadrá skladajú z protónov a elektrónov. V roku 1932 potom James Chadwick (1891–1974, Nobelova cena za rok 1935) objavil neutrón a W. Heisenberg a nezávisle od neho Dmitrij Dmitrijevič Ivanenko (nar. 29. júla 1904) vyslovili hypotézu, podľa ktorej jadrá atómov pozostávajú z protónov a neutrónov.

Heitler sa v neskorších rokoch zaoberal kvantovou elektrodynamikou, fyzikou kozmických lúčov, fyzikou mezonov a teóriou jadrových síl. Zomrel 15. novembra 1981.

Friedrich London sa narodil 7. marca 1900 vo Vratislavi. Do roku 1921 študoval v Mníchove, v rokoch 1928–1933 pôsobil na univerzite v Berlíne. V roku 1933 emigroval do Anglicka, kde pôsobil v Oxforde do r. 1936. Po dvojročnom pobyte v Ústave H. Poincarého v Paríži odišiel do Spojených štátov amerických.

Zaoberal sa kvantovou teóriou atómových a molekulových síl a mocnosťou chemických prvkov. V roku 1927 spolu s Heitlerom vytvoril kvantovomechanický model molekuly vodíka. V roku 1929 vypracoval kvantovomechanickú teóriu vzájomného pôsobenia molekúl v reálnych plynch a v kvapalinách. V roku 1935 spolu s bratom Heintzom Londonom (1907–1970) vypracoval fenomenologickú teóriu supravodivosti. Na jej základe vyslovil i niektoré hypotézy o povahe supravodivého stavu, ktoré sa o 20 rokov neskôr plne potvrdili. Zomrel 30. marca 1954.

by neboli dnešné počítače. Ale znalosť princípu tranzistora, či magnetických pamätí ešte stále nestačí na konštrukciu počítača. A komplikovanosť a mnohorakosť biologických systémov je neporovnateľne väčšia ako tých najväčších počítačov.

8 FYZIKÁLNY VÝZNAM VLNOVEJ FUNKCIE VZŤAH NEURČITOSTI SCHRÖDINGEROVA ROVNICA

8.1 ÚVOD

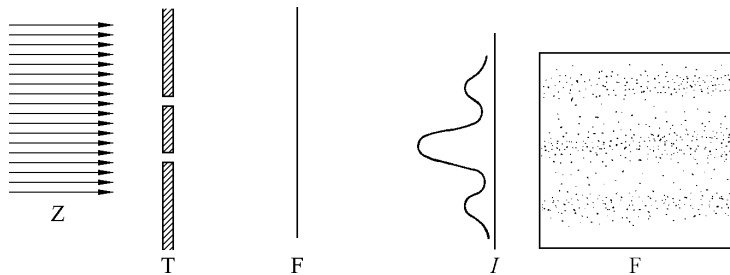
Doteraz sme sa vyhýbali diskusii o fyzikálnom význame de Broglieho vln či už postupných, ktoré odpovedali voľnému elektrónu, alebo stojatých, ktoré boli priradené kvantovým stavom s určitými hodnotami energie. Nehovorili sme ani o princípe neurčitosti ani o Schrödingerovej rovnici. V záverečnej kapitole sa pokúsime aspoň stručne načrtnúť tieto závažné otázky, hoci je nám jasné, že úplnú predstavu o nich možno získať až ďalším štúdiom¹²⁷.

8.2 FYZIKÁLNY VÝZNAM VLNOVEJ FUNKCIE

Tvorca vlnovej mechaniky Schrödinger si predstavoval elektrón ako skutočnú vlnu, hovoril aj o „hmotnostných“ vlnách, ktoré mali opisovať vlnenie hmotnosti spojite rozloženej v priestore. Skoro sa však ukázalo, že takúto predstavu nemožno zlúčiť s „maticovou mechanikou“ Heisenberga a ako sa neskôr ukázalo ani s experimentálnymi výsledkami.

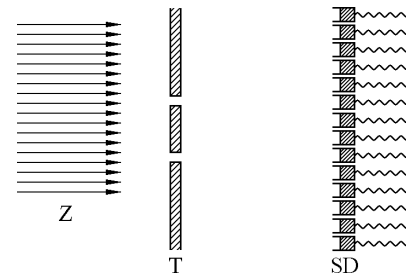
Povahu de Broglieho vln priradených elektrónom azda najjednoduchšie vidieť z diskusie nasledujúceho experimentu, ktorý vystihuje v zjednodušenej forme¹²⁸ výsledky mnohých podobných experimentov s interferenciou de Broglieho vln.

Ravnobežný zväzok elektrónov dopadá na tienidlo s dvoma štrbinami (obr. 8.1a). Obe štrbiny sa podľa Huygensovho princípu stávajú zdrojmi vln, ktoré v oblasti za tienidlom so štrbinami interferujú. Interferenčný obraz možno registrovať na fotografickej platni *F*. Ak by sme sa na takýto obraz pozreli pod mikroskopom, videli by sme, že sa skladá z jednotlivých malých štrbiniek (obr. 8.1b). Podrobnejšia analýza experimentu, prípadne ďalšie úpravy a modifikácie experimentu ukazujú, že každá škvrnka je vyvolaná dopadom jediného elektrónu. O tomto závažnom fakte sa môžeme presvedčiť viacerými spôsobmi.



Obr. 8.1a Ravnobežný zväzok elektrónov dopadá na tienidlo s dvoma štrbinami kolmými na rovinu obrázka. Za tienidlom je fotografická platňa *F*

Obr. 8.1b Výsledné sčernenie je vyvolané bodovými sčerneniami od jednotlivých elektrónov. Naľavo je znázornená intenzita sčernenia



Obr. 8.1c Interferencia elektrónov sledovaná systémom detektorov (*SD*). Pri dostatočne slabom dopadajúcom zväzku *Z* „šfukne“ vždy iba jediný detektor, ktorý zaregistruje celý elektrón. (Štvorčeky označujú jednotlivé detektory, „chvostíky“ za nimi znázorňujú napojenie na elektroniku)

¹²⁷ Vyhýbali sme sa tiež náročnejšiemu matematickému aparátu. Pri diskusii Schrödingerovej rovnice to však už nebudeme môcť dodržať.

¹²⁸ Prehľad viacerých takýchto experimentov možno nájsť v troch článkoch J. Komrsku. publikovaných v časopise *Pokroky matematiky, fyziky a astronómie* začiatkom roku 1982 (podrobnejšie citované už v kap. IV).

Pri prvom z nich by sme mohli zoslabiť zväzok dopadajúcich elektrónov natoľko, že by sme vedeli s určitosťou, že v danom časovom intervale sme mali v zariadení jediný elektrón. Po jeho prechode systémom by sme hneď platňu vyvolali a presvedčili sa o tom, že na nej vidno jediné „bodové“ sčernenie.

Druhý postup by spočíval v nahradení platne sústavou detektorov tak, ako je to naznačené na obr. 8.1c. Pri dostatočne „riedkom“ elektrónovom zväzku by sme zistili, že v danom okamihu „šťukne“ vždy iba jeden detektor. A keby sme merali aj energiu, ktorá do daného detektora pribudla, zistili by sme, že celý elektrón vždy dopadá do jediného detektora.

Výsledky by sa teda dali zhrnúť takto:

1. Zväzok elektrónov prechádzajúcich cez dvojštrbinu vyvolá na platni alebo v sústave detektorov presne taký interferenčný obraz, aký by sme očakávali od dopadajúcej vlny s vlnovou dĺžkou danou de Broglieho vzťahom

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

kde p je hybnosť elektrónov. (Hybnosť elektrónu ľahko určíme z nameranej kinetickej energie E zo vzťahu $p = \sqrt{2mE}$.)

2. Každý elektrón pri dopade na platňu spôsobí bodové sčernenie a pri dopade na sústavu detektorov je vždy celý elektrón zachytený jediným detektorom.

Prvý bod ukazuje jasne, že elektrón *nie je* časticou klasickej fyziky. Keby ňou bol, nemohli by sme vidieť interferenčný obraz. Elektrón by prechádzal buď hornou alebo dolnou štrbinou a na platni by sme videli súčet sčernení od elektrónov, ktoré prešli jednou alebo druhou štrbinou, ale nevideli by sme interferenciu.

Druhý bod ukazuje, že elektrón *nie je* vlnou klasickej fyziky. Vtedy by totiž muselo pri jednotlivých elektrónoch vznikáť spojitě rozložené sčernenie.

Podobné črty sa prejavili vo viacerých reálnych experimentoch. Viedli napokon Maxa Borna v r. 1926 k pravdepodobnostnej interpretácii vlnovej funkcie. Ak $\psi(\mathbf{r}, t)$ opisuje elektrónovú vlnu v rovine platne (alebo v rovine detektorov), potom intenzita tejto vlny

$$I(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

je úmerná pravdepodobnosti toho, že elektrón vyvolá bodové sčernenie v okolí bodu \mathbf{r} v čase t . Takáto interpretácia je v súlade s obidvoma experimentálnymi faktmi uvedenými v bodoch 1. a 2. Na jednej strane $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ bude ukazovať interferenčný obraz, lebo $\psi(\mathbf{r}, t)$ vzniklo zložením vln prichádzajúcich od jednotlivých štrbín a na druhej strane každý elektrón vyvoláva „bodové“ sčernenie.

Táto pravdepodobnostná interpretácia vlnovej funkcie bola preverená v mnohých experimentoch a zatiaľ sa nenašiel nijaký údaj, ktorý by jej protirečil.

Na prvý pohľad sa teda zdá, že elektrón sa šíri cez dve štrbiny ako „vlna“ a dopadá na platňu či do sústavy detektorov ako „častica“. Preto sa niekedy – dosť nešťastne – hovorí o korpuskulárno-vlnovom dualizme. V skutočnosti „vlny“ a „častice“ sú pojmy, ktoré zhrňajú naše skúsenosti s makroskopickými predmetmi klasickej fyziky. Niet dôvodov očakávať, že tieto pojmy môžeme úspešne použiť aj pri opise mikrosвета a zhodou okolností môžeme toto správanie opísať v istom kontexte (šírenie sa elektrónu cez tienidlo s dvoma štrbinami) ako vlnu a v inom kontexte (registrácia elektrónu sústavou detektorov) ako časticu. Namiesto toho, aby sme sa snažili – v teoretickom opise – „donútiť“ elektrón, aby bol klasickou vlnou alebo klasickou časticou, mali by sme byť radi, že sa aspoň niečo z jeho správania dalo opísať pojmami klasickej fyziky.

Zachytenie elektrónu určitým detektorom alebo registrácia elektrónu prostredníctvom „bodového“ sčernenia na fotografickej platni sú špeciálne prípady merania polohy elektrónu.

Podľa pravdepodobnostnej interpretácie vlnovej funkcie platí:

Ak je v istej fyzikálnej situácii stavu elektrónu priradená vlnová funkcia $\psi(\mathbf{r}, t)$ potom je výraz $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Delta V$ úmerný pravdepodobnosti nájsť elektrón pri meraní polohy v čase t v malom objeme ΔV v okolí bodu \mathbf{r} .

Tento fyzikálny význam vlnovej funkcie je celkom cudzí duchu klasickej fyziky. Stav sústavy častíc v klasickej fyzike je určený zadaním ich polôh a rýchlostí. A ak je stav raz daný, potom vieme *presne*, aké hodnoty nájdeme pri meraní polôh jednotlivých častíc.

Už sme viackrát hovorili, že klasická fyzika nie je schopná opísať zákonitosti stavby atómov. Vzniká ale otázka, či je skutočne nevyhnutný až taký odlišný opis, že namiesto striktného determinizmu klasickej fyziky ostanú iba pravdepodobnosti kvantovej fyziky? Otázku by sme mohli položiť aj inak. Pre klasickú fyziku je prirodzený deterministický opis javov, je pre kvantovú fyziku skutočne prirodzený opis pomocou pravdepodobností?

Zdá sa, že odpoveď na túto otázku je kladná – opis pomocou pravdepodobností je skutočne prirodzený pre procesy vo fyzike atómov. Pripomeňme si korešpondenciu Bohra a Rutherforda (kap. 5, čl. 1). Hovorilo sa v nej o tomto: Ak je atóm vodíka v stave s $n = 3$, potom je možný prechod do stavu s $n = 2$ s vyžiarením fotónu s uhlovou frekvenciou $\omega_{32} = (E_3 - E_2)/\hbar$ aj do stavu s $n = 1$ s vyžiarením fotónu $\omega_{31} = (E_3 - E_1)/\hbar$. Obidva prechody sú pozorované, niektoré z atómov vodíka v stave „3“ „skáču“ do stavu „2“ a iné do stavu „1“.

Relatívnu pravdepodobnosť oboch prechodov možno určiť z intenzít príslušných spektrálnych čiar. Takéto pravdepodobnosti prechodov sú preto priamo fyzikálne pozorovateľné veličiny a teória má predpovedať ich veľkosť (a kvantová mechanika to aj robí).

Ukazuje sa teda, že atóm vodíka v stave opísanom vlnovou funkciou $\psi_{3,3}(\mathbf{r}, t)$ preskakuje raz do stavu „2“ a raz do stavu „1“. Pre takéto správanie sa atómov je opis experimentálnych výsledkov pomocou pravdepodobnosti nanajvyšš prirodzený a v rámci kvantovej mechaniky aj jediný možný¹²⁹. Ak totiž sústava z jedného a toho istého stavu „3“ raz prechádza do stavu „2“ a raz do stavu „1“, potom tento prechod nemožno opísať striktno deterministicky – vtedy by totiž sústava z jednoznačne určeného začiatočného stavu musela prejsť do jednoznačne zadaného konečného stavu a nemohla by si „vyberať“ tak, ako tu si atóm „vyberá“ medzi prechodom do stavu „2“ a do stavu „1“.

8.3 KOMPLEXNÉ VLNOVÉ FUNKCIE, PRINCÍP SUPERPOZÍCIE

Keď sme v článku 2 v kapitole 4 hovorili o stojatých vlnách na strune, napísali sme priamo závislosť výchylky struny $u(x, t)$ ako funkciu času t a polohy x . Dostali sme vtedy

$$u(x, t) = A \cos(\omega_n t) \sin(k_n x) \quad (1)$$

kde A označovalo amplitúdu, ω_n uhlovú frekvenciu daného čistého harmonického kmitu a k_n bolo dané vzťahom

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n}, \lambda_n = \frac{2L}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2)$$

Tvar (1) odpovedá špeciálnemu prípadu výberu začiatku pri rátaní času. Pre $t = 0$ dosahuje $\cos(\omega_n t)$ svoju maximálnu hodnotu $\cos(0) = 1$, a preto tvar (1) zodpovedá výberu začiatku času tak, aby struna pri $t = 0$ mala maximálnu výchylku z rovnovážnej polohy. Pri inom výbere začiatku času by sme dostali amplitúdu typu

$$u(x, t) = A \cos(\omega_n t + \varphi) \sin(k_n x) \quad (3)$$

kde φ je určité číslo. Pretože platí $\sin \alpha = \cos(\alpha - \pi/2)$, dostali by sme pri výbere $\varphi = -\pi/2$ stojatú vlnu zapísanú v tvare

$$u(x, t) = A \sin(\omega_n t) \sin(k_n x) \quad (4)$$

Fyzikálny rozdiel medzi stojatými vlnami (1) a (3) je len v ich relatívnom časovom posune.

Keď sme hovorili o stojatých de Broglieho vlnách patriacich k elektrónu viazanému na úsečku, nevypisovali sme nikde explicitne časovú závislosť vln a teraz uvidíme, prečo sme to nemohli tak jednoducho

¹²⁹ V kvantovej mechanike je stav sústavy úplne určený udaním jej vlnovej funkcie. Ak atóm vodíka zo stavu s vlnovou funkciou $\psi_{3,3}(\mathbf{r}, t)$ raz prechádza do stavu „2“ a raz do stavu „1“, potom môžeme udať pre tieto prechody len príslušné pravdepodobnosti. Ak by sme chceli, aby opis bol deterministický, museli by sme zaviesť ďalší, „skrytý“ parameter λ , ktorý by bol informáciou navyše k tej informácii, ktorá je už obsiahnutá vo vlnovej funkcii. Pri istých hodnotách „skrytého“ parametra λ , by atóm vodíka preskočil zo stavu „3“ do stavu „2“, pri iných hodnotách λ by preskočil do stavu „1“. Pokusy o vybudovanie teórie so skrytými parametrami nevedli k ničomu pozitívnemu a dnes sa zdá, že tie najprirodzenejšie z nich (lokálne teórie so skrytými parametrami) sú experimentálne vylúčené. O tom tu však hovoriť nebudeme.

urobiť. Predstavme si, že by sme elektrónu viazanému na úsečku priradili bež veľkého rozmýšľania priamo vlnu (1) a zapísali by sme

$$\psi(x, t) = A \cos(\omega_n t) \sin(k_n x) \quad (5)$$

Z predchádzajúceho článku už ale vieme, že $|\psi(x, t)|^2 \Delta x$ je pravdepodobnosť nájsť elektrón v čase t v intervale dĺžky Δx v okolí bodu x . Ak ale spočítame druhú mocninu absolútnej hodnoty $\psi(x, t)$ daného v (5), zistíme, že

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2 \cos^2(\omega_n t) \sin^2(k_n x) \quad (6)$$

Pre $t \neq \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi/\omega_n$, (n je celé číslo), je tento výraz rôzny od nuly a celková pravdepodobnosť nájsť elektrón niekde na úsečke je teda nenulová.

Pre $t = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi/\omega_n$, n celé, ale $\cos(\omega_n t) = 0$, preto $|\psi(x, t)|^2 = 0$ a pravdepodobnosť nájsť elektrón niekde na danej úsečke by sa rovnala nule.

Priradenie stojatej vlny typu (1) by spolu s pravdepodobnostnou interpretáciou vlnovej funkcie viedlo k „patologickému“ záveru – elektrón opísaný takouto vlnovou funkciou by periodicky mizol a znovu sa objavoval.

To isté by sa nám stalo aj vtedy, keby sme elektrónu viazanému na úsečku priradili hociktorú zo stojatých vln typu (3).

Z fyzikálnych dôvodov pritom očakávame niečo celkom iného; ak raz vieme, že elektrón sa nachádza na danej úsečke, potom celková pravdepodobnosť nájsť ho na hociktorom mieste tejto úsečky nesmie závisieť od času a navyše musí sa rovnať jednej (určite ho tam nájdeme).

Túto požiadavku možno splniť iba tak, že stojatá vlna priradená elektrónu bude komplexná. Prenecháme čitateľovi, aby porozmýšľal o nevyhnutnosti tohto kroku a rovno napíšeme riešenie

$$\psi(x, t) = A [\cos(\omega_n t) + i \sin(\omega_n t)] \sin(k_n x) \quad (7)$$

Podstata triku je v tom, že absolútna hodnota komplexného čísla $\cos \alpha + i \sin \alpha$ sa rovná jednej. Skutočne, absolútna hodnota komplexného čísla $a + ib$ (a, b reálne) je definovaná vzťahom

$$|a + ib| = \sqrt{a^2 + b^2}$$

a podľa tohto máme

$$|\cos \alpha + i \sin \alpha| = \sqrt{\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha}$$

Na začiatku štúdia vyššej matematiky alebo ku koncu štúdia tej predchádzajúcej sa študent stretáva s podivuhodnou a hlbokou formulkou¹³⁰

$$e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha \quad (8)$$

Jej celú hĺbku tu nebudeme potrebovať a na ľavú stranu v (8) sa môžeme pozerat' len ako na skrátenejší zápis dobre známeho výrazu na pravej strane. Z predchádzajúceho potom tiež vieme, že

$$|e^{i\alpha}| = |\cos \alpha + i \sin \alpha| = 1 \quad (9)$$

a samozrejme tiež

$$|e^{-i\alpha}| = 1$$

Komplexnú vlnovú funkciu s požadovanými fyzikálnymi vlastnosťami teraz už ľahko uhádneme. Zapišeme rovno¹³¹

$$\psi(x, t) = A e^{-i\omega_n t} \sin(k_n x) \quad (10)$$

¹³⁰ Odporúčame čitateľovi, aby si prečítal krátku a peknú poému o tejto formulke v knihe R. Feynman a spol.: *Feynmanove prednášky z fyziky*. Bratislava : Alfa, 1980.

¹³¹ Znamienko v exponente je otázkou konvencie.

Pre túto platí

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2 \sin^2(k_n x)$$

čo skutočne nezávisí od času.

Ostáva nám ešte určiť hodnotu konštanty A . Rozdelíme celú úsečku $0 \leq x \leq L$, na ktorej sa elektrón môže nachádzať, na malé intervaly s dĺžkou $(\Delta x)_n$. Ich súčet je rovný dĺžke úsečky L

$$(\Delta x)_1 + (\Delta x)_2 + \dots + (\Delta x)_N = L$$

Pravdepodobnosť pre nájdenie elektrónu na intervale $(\Delta x)_i$ je daná výrazom $|\psi(x_i, t)|^2 (\Delta x)_i$, kde x_i leží vnútri intervalu $(\Delta x)_i$. Celková pravdepodobnosť nájsť elektrón na tejto úsečke bude

$$\sum_{i=1}^N |\psi(x_i, t)|^2 (\Delta x)_i = \sum_{i=1}^N |A|^2 \sin^2(k_n x_i) (\Delta x)_i$$

Pri postupnom zjemňovaní delenia tento výraz prechádza na

$$\int_0^L |A|^2 \sin^2(k_n x) dx = |A|^2 \frac{1}{2} L$$

Uvedenú hodnotu možno ľahko spočítať alebo „uhádnuť“.¹³² Celková pravdepodobnosť pre nájdenie elektrónu na tejto úsečke musí byť rovná jednej (vieme určiť, že elektrón je tam), a preto

$$|A|^2 \frac{1}{2} L = 1$$

Odkiaľ

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

pričom sme A zvolili ako reálne a kladné.

Hodnotu ω_n vystupujúcu v (10) môžeme vyjadriť pomocou energie príslušného kvantového stavu

$$\omega_n = E_n / \hbar$$

a napokon máme

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{-iE_n t / \hbar} \sin(k_n x) \quad (11a)$$

čo je úplné vyjadrenie vlnovej funkcie elektrónu viazaného na úsečku dĺžky L v n -tom kvantovom stave. Prítom platí

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n}, \quad \lambda_n = \frac{2L}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (11b)$$

Teraz prejdeme k diskusii *vlnovej funkcie pre voľnú časticu*. Začneme s elektrónom, ktorý sa pohybuje v kladnom smere osi x . Podľa de Broglieho vzťahov je takémuto elektrónu priradená rovinná vlna s uhlovou frekvenciou ω , vlnovým vektorom \mathbf{k} a vlnovou dĺžkou λ , pričom

$$\omega = E / \hbar, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \lambda = \frac{2\pi \hbar}{p} \quad (12a)$$

Z ostatných dvoch rovníc dostávame často používaný vzťah medzi hybnosťou \mathbf{p} a vlnovým vektorom \mathbf{k}

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad k \equiv \frac{2\pi}{\lambda} \quad (12b)$$

¹³² Pri počítaní sa používa vzťah $2 \sin^2 \alpha = 1 - \cos(2\alpha)$. Pri uhádnutí si treba uvedomiť, že a) integrál z $f(x) = 1$ cez úsečku dĺžky L je rovný L , b) $\cos^2(k_n x) + \sin^2(k_n x) = 1$, c) integrál z $\cos^2(k_n x)$ je rovnaký ako integrál z $\sin^2(k_n x)$, lebo funkcie $\sin(k_n x)$, $\cos(k_n x)$ sa odlišujú len posunutím a integrujeme vždy cez celý počet polvln.

Reálnu vlnu, napríklad na vodnej hladine v úzkom kanáli alebo postupnú vlnu na gumenej hadici, by sme opisovali závislosťami (kapitola 4, článok 2)

$$u_1(x, t) = A \sin(kx - \omega t) \quad (13a)$$

$$u_2(x, t) = A \cos(kx - \omega t) \quad (13b)$$

alebo ich ľubovoľnou lineárnou kombináciou.

Keby sme pre opis vlnovej funkcie voľného elektrónu zobrali napríklad (13a), dostali by sme pre pravdepodobnosti nájdenia elektrónu v okolí bodu x v čase t výraz

$$|A|^2 \sin^2(kx - \omega t)$$

ktorý je (pri danom t) periodickou funkciou x a pri niektorých hodnotách x nadobúda zas nulové hodnoty. Toto by zase bolo fyzikálne neprirodené. Dobrým priblížením k rovinným vlnám by totiž boli elektróny, ktoré produkuje rovnomerne pracujúce elektrónové delo udeľujúce elektrónom presne určenú energiu. Očakávali by sme preto rovnomerný prúd častíc, ktoré sa šíria pozdĺž osi x . Pri takomto prúde by tiež pravdepodobnosť nájst' časticu v okolí bodu x nezávisela od bodu x a bola by konštantou. Potrebujeme teda vlnovú funkciu, ktorej absolútna hodnota by bola konštantná a vlnová dĺžka a uhlová frekvencia by boli dané vzťahmi (12). Po skúsenosti s prípadom stojatej vlny už riešenie uhádneme jednoducho; stačí vziať komplexnú funkciu danú kombináciou $u_2(x, t) + iu_1(x, t)$, kde u_1, u_2 sú zapísané explicitne v (13a), (13b). Zas využijeme zápis (8) a máme

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} = A e^{i(px - Et)/\hbar} \quad (14)$$

Poznamenajme ešte, že často používame aj zápis

$$\exp(i\alpha) \equiv e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$$

Vlnová funkcia v (14) má skutočne $|\psi(x, t)|^2$ nezávislé od x, t , ako to očakávame; platí $|\psi(x, t)|^2 = |A|^2$ a pravdepodobnosť výskytu častice v okolí nejakého bodu nezávisí ani od x ani od t .

Zovšeobecnenie na prípad častice s presne danou hodnotou hybnosti p a energie E je už jednoduché. Vlnová dĺžka a uhlová frekvencia príslušnej, de Broglieho vlny budú

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

Vlnový vektor (teraz už bude skutočne vektorom) definujeme vzťahom

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{n}$$

kde \mathbf{n} je jednotkový vektor v smere \mathbf{p} . Príslušná de Broglieho vlna bude

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] = A \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar] \quad (15)$$

Pri diskusiách o interferencii klasických vln alebo de Broglieho vln sme využívali *princíp superpozície* (slovensky najskôr „princíp skladania“). Keď sme sa zaoberali s interferenčným obrazom pri rovinatej vlne prechádzajúcej cez dve štrbiny v tienidle, uvažovali sme vlastne takto: ak $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ je vlna pochádzajúca od jednej štrbiny a vlna $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ pochádza od druhej štrbiny, potom výsledná vlna je jednoduchým zložením oboch vln ψ_1, ψ_2

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t)$$

Takisto sme postupovali pri diskusii Davissonovho a Germerovho experimentu, len tu úlohu vlny ψ_1 , hrala vlna rozptýlená jedným atómom na povrchu kryštálu a úlohu ψ_2 vlna rozptýlená iným atómom (fakticky by sme tu mali uvažovať explicitne vlny rozptýlené jednotlivými atómami a mali by sme potom výrazy typu $\psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \dots$).

Celkom rovnako postupujeme pri skúmaní interferencie vln na vodnej hladine, vln na gumenej hadici, zvukových aj elektromagnetických vln.

Na tento postup skladania vln sa môžeme pozerat' z dvoch hľadísk. Pri prvom sa zaujíname o to, čo vznikne zložením dvoch či viacerých vln. Ak ψ_1 , je vlna vzbudená na vodnej hladine jedným kameňom hodeným do vody a vlna ψ_2 je vlna vzbudená druhým kameňom, má zmysel pýtať sa na typ vlny vzbudenej súčasne obidvoma kameňmi. Princíp superpozície nám tu hovorí, aby sme jednoducho zložili obe amplitúdy¹³³.

Pri druhom hľadisku sa pýtame, aká je množina všetkých možných vlnových procesov daného typu, napr. kmitov vodnej hladiny alebo de Broglieho vln spojených s voľnou časticou a pod.

Na prvý pohľad to hádam vyzerá prekvapujúco, ale princíp superpozície s trochou matematiky poskytuje úplnú odpoveď. Prediskutujeme ho trocha podrobnejšie na prípade jedného voľného elektrónu pohybujúceho sa, kvôli zjednodušeniu, zatiaľ len v smere osi x . Ako už vieme, postupná vlna zodpovedajúca elektrónu s hybnosťou \mathbf{p} a vlnovým vektorom \mathbf{k} má tvar (pritom \mathbf{p} i \mathbf{k} majú smer osi x)

$$\varphi(x, t) = C_x \exp [i(kx - \omega t)] \quad (16a)$$

kde

$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad \omega_k = \frac{E_k}{\hbar}, \quad E_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (16b)$$

Princíp superpozície hovorí, že skladaním takýchto stavov dostaneme zas možný kvantovomechanický stav. Všeobecný prípad vlnového procesu odpovedajúceho jedinému voľnému elektrónu pohybujúcemu sa v smere osi x potom bude

$$\psi(x, t) = \sum_k C_k \exp [i(kx - \omega_k t)] \quad (17)$$

kde koeficienty C_k môžu nadobúdať ľubovoľné hodnoty¹³⁴.

Zovšeobecnenie na voľnú časticu pohybujúcu sa v troch rozmeroch je už jednoduché. Napíšeme ho bez podrobnejšej diskusie. Rovinná vlna patriaca elektrónu s hybnosťou \mathbf{p} má tvar

$$C_{\mathbf{k}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$$

kde

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad \omega_{\mathbf{k}} = \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar}, \quad E_{\mathbf{k}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \quad (18)$$

a všeobecná superpozícia takýchto stavov je

$$\sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)]$$

pričom index \mathbf{k} zastupuje tri zložky vektora $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$ a v (19) sčítujeme cez všetky možné hodnoty všetkých troch zložiek¹³⁵ k_1, k_2, k_3 .

Ukazuje sa, že (17) alebo (19) pokrývajú veľmi širokú triedu funkcií. Napríklad pri istom fixovanom t , napríklad $t = 0$, možno superpozíciou typu (17) ľubovoľne presne aproximovať hocikáku „fyzikálne rozumnú“ funkciu. Pokus o spresnenie tohto tvrdenia by nás ale zaviedol rovno do privysokaj matematiky.

8.4 SCHRÖDINGEROVA ROVNICA

Schrödingerova rovnica (ďalej len SchR) je základnou rovnicou kvantovej mechaniky. Nemožno ju preto odvodiť z klasickej fyziky, podobne ako nemožno odvodiť Newtonove zákony z výsledkov pred

¹³³ Pripomíname, že „amplitúda“ tu označuje okamžitú a nie maximálnu výchylku.

¹³⁴ V najvšeobecnejšom prípade treba ešte uvážiť, že k vystupujúce v (16) sa môže meniť spojite a potom musíme písať

$$\psi(x, t) = \int dk c(k) \exp [i(kx - \omega_k t)]$$

pričom $c(k)$ už je funkciou k a integrujeme od $-\infty$ po $+\infty$.

¹³⁵ Najvšeobecnejší zápis by si aj tu vyžadoval integrovanie cez \mathbf{k} .

newtonovskej fyziky. Nový zákon musí autor skutočne „uhádnuť“. Bolo by určite veľmi poučné prejsť znova cestu, ktorou Schrödinger prišiel k svojej rovnici, ale táto cesta je na účely tejto knihy príliš ťažká. Uvedieme preto len niekoľko argumentov, ktoré by mali urobiť SchR prijateľnou.¹³⁶ Budeme postupovať tak, že najprv nájdeme rovnicu, ktorej riešením je všeobecná vlnová funkcia pre voľnú časticu a potom „uhádneme“, ako do rovnice zabudovať tú zmenu, ktorá zodpovedá vonkajšiemu silovému poľu pôsobiacemu na časticu. Tým dostaneme časovú SchR opisujúcu časovú závislosť vlnovej funkcie častice v poli vonkajších síl. Napokon všimneme podrobnejšie situáciu zodpovedajúcu „stacionárnym stavom“, t. j. stojatým vlnám (čistým harmonickým kmitom de Broglieho vln) a nájdeme „bezčasovú SchR“ opisujúcu kvantové stavy elektrónu vo vonkajšom poli, ktoré patria diskretným „kvantovým“ hodnotám energie.

Zdôraznime ešte raz, že argumenty, ktoré tu uvádzame, nie sú v nijakom prípade „dôkazom“, napokon správnosť SchR tak – ako iných základných zákonov – sa preveruje súhlasom jej dôsledkov s experimentálnymi výsledkami.

Teraz už ideme nájsť rovnicu pre voľnú časticu. Začneme zasa s jednorozmerným pohybom. Špeciálnym prípadom je jednoduchá rovinná vlna

$$\psi_k(x, t) = e^{i(kx - \omega_k t)}$$

Ak túto funkciu derivujeme podľa času¹³⁷, máme

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega_k \psi_k(x, t)$$

a po násobení faktorom $i\hbar$ dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hbar\omega_k \psi_k(x, t) = E_k \psi_k(x, t) \quad (18)$$

Platí ale

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

a pravú stranu v (18) môžeme dostať aj iným spôsobom. Pri derivovaní $\psi_k(x, t)$ podľa x nájdeme

$$\frac{\partial \psi_k(x, t)}{\partial x} = ik \psi_k(x, t)$$

Ak derivujeme ešte raz, máme

$$\frac{\partial^2 \psi_k(x, t)}{\partial x^2} = (ik)^2 \psi_k(x, t) = -k^2 \psi_k(x, t)$$

Vynásobme obe strany tejto rovnice výrazom $-\hbar^2/(2m)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_k(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi_k(x, t) = E_k \psi_k(x, t) \quad (19)$$

Rovnice (18) a (19) majú rovnaké pravé strany, preto budú rovnaké aj ľavé strany a máme

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial x^2} \quad (20)$$

¹³⁶ Je to tak trochu ako s výstupom na horu. Prvolec zlezie s obrovskou námahou, ďalším sa už lezie ľahšie a neskoršie sa návštevníci veľhôr vozia lanovkami.

¹³⁷ Používame tu symbol $\frac{\partial}{\partial x}$, ktorý označuje parciálnu deriváciu. Význam parciálnej derivácie je nasledujúci. Ak uvažujeme funkcie viacerých premenných, ako napríklad $f(x, y)$ a teda premenné x, y , potom parciálna derivácia podľa x je vlastne obyčajnou deriváciou podľa x pri ostatných premenných fixovaných; napr. $\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \varepsilon, y) - f(x, y)}{\varepsilon}$

V predchádzajúcom článku sme videli, že najvšeobecnejšia vlnová funkcia priradená voľnej častici má tvar

$$\psi(x,t) = \sum_k C_k \psi_k(x,t) = \sum_k C_k \exp[i(kx - \omega_k t)] \quad (21)$$

Na pravej strane (21) máme takto superpozíciu členov, z ktorých každý spĺňa rovnicu (20). Ľahko sa možno presvedčiť o tom, že aj takáto superpozícia spĺňa rovnicu¹³⁸

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \quad (22)$$

Argument možno zopakovať krok za krokom aj pre prípad vlnových funkcií odpovedajúcich voľnej častici v troch rozmeroch. Najprv by sme ukázali, že pre rovinnú vlnu

$$\psi_{k_1, k_2, k_3}(\mathbf{r}, t) = \exp[i(k_1 x + k_2 y + k_3 z - \omega_{\mathbf{k}} t)] \quad (23)$$

kde

$$E_{\mathbf{k}} = \hbar \omega_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$$

platí

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi$$

a potom by sme sa presvedčili o tom, že (24) platí aj pre ľubovoľnú superpozíciu rovinných vln typu (23).

Aby (24) vyzeralo opticky kratšie, zavádzame symbol Δ (nazývaný Laplaceovým operátorom)

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

a prepisujeme (24) do tvaru

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \quad (25)$$

Rovnica (22) je časovou Schrödingerovou rovnicou pre vlnovú funkciu voľnej častice pohybujúcej sa v jednom rozmere a (25) je takouto rovnicou pre vlnovú funkciu voľnej častice v troch rozmeroch.

Teraz vzniká otázka, ako treba SchR (22) alebo (25) zmeniť ak častica nie je voľná, ale pohybuje sa v poli opísanom potenciálnou energiou $V(x)$ (alebo v troch rozmeroch $V(\mathbf{r})$). Príslušnú zmenu možno uhádnuť nasledovne. Ak sa pozrieme na (18) vidíme, že výraz $i\hbar(\partial/\partial t)$ pri pôsobení na vlnovú funkciu ψ_k dáva práve energiu častice. Podobne z (19) vidno, že výraz $(-\hbar^2/2m)(\partial^2/\partial x^2)$ dáva pri pôsobení na ψ_k práve kinetickú energiu častice $p^2/2m$.

Rovnica (22) má takto na ľavej strane výraz odpovedajúci energii a na pravej strane výraz zodpovedajúci kinetickej energii. Potenciálnu energiu je potom prirodzené pridať ku kinetickej energii. V jednom rozmere tak dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) \quad (26)$$

a v troch rozmeroch máme

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t) \quad (27)$$

Toto je skutočne časová Schrödingerova rovnica.

¹³⁸ Presvedčiť sa o tom možno hrubou silou dosadením (21) do (22) a porovnaním členov na oboch stranách. Jednoduchšie to vidno z toho, že rovnica (22) je lineárna diferenciálna rovnica a superpozícia dvoch riešení takejto rovnice je zas riešením.

Riešeniami rovnice pre voľnú časticu (22) boli ľubovoľné superpozície (21) rovinných vln, pričom rôzne rovinné vlny majú rôzne energie. Riešeniami (26) a (27) budú tiež analógie rovinných vln,¹³⁹ ale navyše – pre potenciálnu energiu $V(x)$ zodpovedajúcu silám udržujúcim časticu v istej oblasti priestoru – budeme mať aj riešenia odpovedajúce diskretným „kvantovaným“ hodnotám energie.

Ako sme už hovorili, takéto riešenia zodpovedajú vlastne stojatým de Broglieho vlnám. A práve tieto riešenia si všimneme teraz podrobnejšie.

S jedným špeciálnym prípadom stojatej de Broglieho vlny sme sa už stretli v (11). Typické pre ňu je, že časová závislosť je obsiahnutá vo faktore $\exp(-iEt/\hbar)$ a tento faktor je násobený priestorovým tvarom stojatej vlny. Budeme preto predpokladať, že aj riešenia (26) zodpovedajúce stojatým vlnám majú tvar

$$\psi_n(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar} u_n(x, t) \quad (28)$$

kde prvý faktor určuje časovú závislosť a druhý faktor tvar stojatej vlny. Pripomeňme ešte raz, že tento špeciálny tvar je vynútený dvoma fyzikálnymi požiadavkami:

1. stojatá vlna, či čistý harmonický kmit, musí byť charakterizovaná jedinou frekvenciou,
2. riešenie zodpovedajúce častici v stave s určitou energiou je „stacionárne“ v tom zmysle, že rozdelenie pravdepodobnosti pre nájdenie častice v jednotlivých oblastiach priestoru, dané výrazom $|\psi(x, t)|^2$, nezávisí od t .

Riešenie (28) spĺňa prirodzene tieto požiadavky. Index n , ktorý v (28) vystupuje, čísluje jednotlivé prípady kvantových stavov s diskretnými hodnotami energie.

Ak teraz dosadíme (28) do (26) a vo výsledku skrátime faktor $\exp(-iEt/\hbar)$ vystupujúci na oboch stranách, dostaneme *bezčasovú Schrödingerovu rovnicu*

$$E_n u_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_n}{dx^2} + V(x) u_n(x) \quad (29)$$

Pre pohyb častice v troch rozmeroch by sme postupovali celkom analogicky a dostali by sme sa k rovnici

$$E_n u_n(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u_n(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}) \quad (30)$$

Z (30) už čisto matematickým postupom možno získať všetky vlnové funkcie atómu vodíka a príslušné hodnoty energie; stačí len za $V(\mathbf{r})$ dosadiť $-e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ a doriešiť (30). S tým sa tu ale zaoberať nebudeme.

Rovnicu (29) by sme mohli „uhádnuť“ aj priamo, bez toho, že by sme sa najprv zaoberali časovou Schrödingerovou rovnicou. Mohli by sme postupovať nasledovne. Uvažujeme stojatú vlnu, ktorá zodpovedá voľnej častici, t. j. funkciu

$$u(x) = \sin\left(2\pi \frac{x}{\lambda}\right)$$

Takáto funkcia spĺňa rovnicu

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} u(x) \quad (31)$$

o čom sa ľahko presvedčíte, keď dva razy zderivujete $u(x)$. Podľa de Broglieho vzťahu $\lambda = 2\pi\hbar/p$ a odtiaľ

$$\lambda^2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{p^2} = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2mE_k} \quad (32)$$

kde E_k je kinetická energia $E_k = p^2/2m$. Ak sa častica pohybuje v silovom poli s potenciálnou energiou $V(x)$, potom očakávame, že namiesto E_k bude v (32) výraz $E_k = E - V(x)$, kde E je celková energia. Ak toto dosadíme do (32) a príslušný výraz pre λ^2 potom vložíme do (31), dostaneme priamo (29), v ktorom sme celkovú energiu označili (s prihliadnutím na kvantovanie) indexom n .

¹³⁹ Budú to rovinné vlny ovplyvnené prítomnosťou potenciálnej energie v SchR.

8.5 SCHRÖDINGEROVA ROVNICA A KVANTOVANIE ENERGIE

Teraz si na jednoduchom príklade ukážeme ako pracuje mechanizmus kvantovania energie pomocou bezčasovej SchR (29). Budeme teda uvažovať časticu, ktorá sa môže pohybovať iba v jednom rozmere a nachádza sa v silovom poli s potenciálnou energiou $V(x)$, ktorá je daná jednoduchou funkciou (pozri obr. 8.2).

$$V(x) = 0 \text{ pre } |x| > a \quad (33)$$

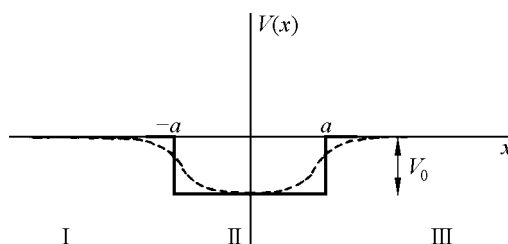
$$V(x) = -V_0 \text{ pre } -a \leq x \leq a$$

Takýto priebeh potenciálnej energie nazývame „potenciálovou jamou“. Pravouhlá „jama“ (33) je v skutočnosti priblížením ku komplikovanejším a realistickejším tvarom potenciálnej energie (pozri obr. 8.2). Termín „potenciálová jama“ sa zdá veľmi akademický, ale v skutočnosti odpovedá celkom jednoduchým veciam. Uvedieme niekoľko príkladov

– elektrón sa nachádza v malom kúsku kovu. Keď sa snaží opustiť kov, pôsobia naň sily, ktoré ho priťahujú naspäť do kovu. V istom priblížení tieto sily môžeme opísať potenciálovou jamou,

– ak je elektrón v tenkej vrstve a vyšetrujeme jeho pohyb v smere kolmom na vrstvu, potom v istom priblížení môžeme elektrón opísať ako časticu v jednorozmernej jame,

– neutrón je v atómovom jadre viazaný na oblasť jadra. Aj tu môžeme pohyb neutrónu opísať ako pohyb častice v trojrozmernej jame.



Obr. 8.2 Priebeh potenciálnej energie pre jednoduchú pravouhlú potenciálovú jamu (spojitá čiara). Realistickejší priebeh $V(x)$ je znázornený prerušovanou čiarou

Pri klasickej analógii by sme mohli povedať, že častica v jame je ako častica v oblasti ohraničenej čiastočne odrazujúcimi stenami. Nekonečne hlboká jama odpovedá úplne odrazujúcim stenám. Riešenie $\Phi(x)$ bezčasovej SchR (29) musí spĺňať niekoľko fyzikálnych podmienok. Výraz $|\Phi(x)|^2 dx$ udáva pravdepodobnosť pre nájdenie častice v intervale $(x, x + dx)$. Pretože vieme, že v jame je „uväznená“, t. j. je vo viazanom stave – a len o takéto javy sa teraz zaujímate – jediná častica, musí byť celková pravdepodobnosť pre to, že ju nájdeme niekde na osi x , rovná jednej. Preto

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(x)|^2 dx = 1 \quad (34)$$

Hlbavý čitateľ si tu asi všimol, že na jednej strane vravíme o častici uväznenej v jame a na druhej strane v (34) integrujeme cez celý interval. Ako uvidíme ďalej, častica „viazaná v jame“ má nenulovú pravdepodobnosť výskytu aj v oblasti „okolo jamy“.

Navyše, pri realistskom potenciáli musí byť $\Phi(x)$ riešením (29) v každom bode. Preto v každom bode existuje konečné $d^2\Phi/dx^2$ a odtiaľ vyplýva, že $\Phi(x)$ aj $d\Phi/dx$ musia byť spojité funkcie. Táto spojitosť $\Phi(x)$ a $d\Phi/dx$ sa nepokazí pri prechode od realistskej jame (obr. 8.2) k pravouhlej jame, tvrdenia ale nebudeme podrobnejšie dokazovať. Žiadame teda, aby riešenie $\Phi(x)$ rovnice (29) spĺňalo nasledujúce podmienky:

1. bolo spojité v celom intervale $-\infty < x < \infty$,
2. malo v tomto intervale spojitú prvú deriváciu,
3. spĺňalo normovaciu podmienku (34).

Ako hneď uvidíme, (29) má len pri určitých diskrétnych hodnotách energie E_n riešenia vyhovujúce uvedeným trom podmienkam. Najprv rozdelíme celý interval $-\infty < x < \infty$ na tri časti tak, ako je to naznačené na obr. 8.2 (hranice sú pri $x = -a, x = a$). Budeme hľadať riešenie rovnice (29) pri $E < 0$, t. j. pre viazané stavy častice (pri $E > 0$ častica môže uniknúť z jamy na ľubovoľnú vzdialenosť). Určíme najprv riešenia v jednotlivých oblastiach, I, II, III, vnútri ktorých je potenciálna energia konštantná. V oblastiach I a III je potenciálna energia nulová a rovnica má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} = Eu(x) = -|E|u(x)$$

Prepíšeme ju takto

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = +\alpha^2 u(x), \quad \alpha^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

Všeobecné riešenie tejto rovnice, ako sa môžeme rýchlo presvedčiť, bude

$$u(x) = Ae^{-\alpha x} + Be^{\alpha x}$$

kde A, B sú dve ľubovoľné konštanty. V oblasti I je x záporné, $x = -|x|$ a riešenie zapíšeme ako

$$u(x) = Ae^{-\alpha x} + Be^{\alpha x} = Ae^{\alpha|x|} + Be^{-\alpha|x|} \quad (35)$$

V oblasti III

$$u(x) = F e^{-\alpha x} + G e^{\alpha x} \quad (36)$$

V oblasti II máme $V(x) = -V_0$, a preto tu môžeme (29) prepísať ako

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} - V_0 u(x) = Eu(x)$$

Po elementárnej úprave

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = -\beta^2 u(x), \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)$$

Pritom platí $-V_0 < E < 0$, lebo energia viazaného stavu musí byť väčšia ako minimum potenciálnej energie a konštanta β^2 je určite kladná. Všeobecné riešenie tejto rovnice je v oblasti II:

$$u(x) = C \sin(\beta x) + D \cos(\beta x)$$

Aby sme dostali riešenie rovnice (29), musíme teraz spojiť, alebo ako sa hovorí, „zošit“¹⁴⁰ riešenia v jednotlivých oblastiach. Navyše musíme riešenie vybrať tak, aby spĺňalo všetky tri už uvedené podmienky.

Všetko máme pripravené a problém môžeme formulovať ako „hru“¹⁴⁰. Vyberieme si istú energiu, napr. E' a pozrieme sa, či (29) má pri nej riešenie spĺňajúce všetky podmienky. Začneme s oblasťou I. V riešení (35) musíme položiť $A = 0$, inak by $u(x)$ nemohla byť normovaná na jednotku. Skutočne

$$\int_{-\infty}^a |u(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^a |Ae^{\alpha|x|} + Be^{-\alpha|x|}|^2 dx$$

pre $A = 0$ diverguje. Riešenie v oblasti I musí mať preto tvar $B \exp(-\alpha|x|)$ a konštantu B zatiaľ možno vybrať ľubovoľne, napríklad $B = 1$.

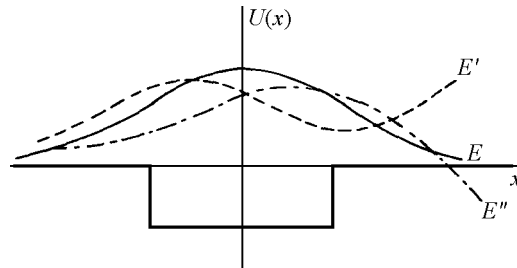
Ak prechádzame z oblasti I do oblasti II, musíme žiadať, aby $u(x)$ aj $du(x)/dx$ boli spojité na hranici oboch oblastí, teda v bode $x = -a$. Tieto dve podmienky pri danom B určia jednoznačne oba koeficienty C, D v (37). Pomocou riešenia (37) takto pokračujeme až na hranicu medzi oblasťami II a III, kde zas

¹⁴⁰ Takáto „hra“ sa dá naprogramovať na počítači, čo po troche vylepšenia umožňuje skutočne počítať energie a vlnové funkcie viazaných stavov nielen pre časticu v pravouhlej jamy, ale aj pre realistickejšie systémy.

v bode $x = a$ žiadame spojitost $u(x)$ a du/dx . Tieto dve podmienky nám pri danom C, D (a tie už dané sú) jednoznačne určia konštanty F, G v (36). Ak sa stane, že $G \neq 0$ je zle, pretože

$$\int_{-\infty}^a |u(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^a |Fe^{-\alpha x} + Ge^{\alpha x}|^2 dx$$

diverguje a funkcia $u(x)$ sa nedá normovať na jednotku.



Obr. 8.3 Ilustrácia „mechanizmu“ kvantovania energie pri riešení bezčasovej SchR pre časticu v pravouhlej potenciálovej jame (tiež naznačená). Pri energiách E', E'' nedostávame vyhovujúce riešenie, lebo vlnová funkcia nespĺňa rovnicu (34), pri energii E vyhovujúce riešenie existuje

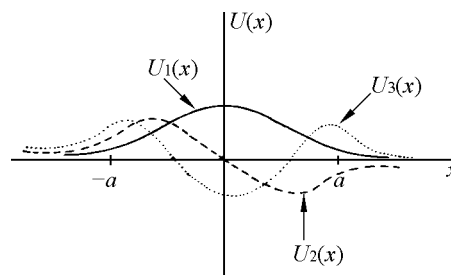
Dobré riešenie nájdeme teda len pri takej hodnote energie E , pri ktorej v oblasti I začneme s riešením $\exp(-\alpha|x|)$ a v oblasti III dostaneme zasa riešenie $\exp(-\alpha|x|)$. To nastáva len pri určitých diskretných hodnotách energie E . Najlepšie je azda načrtnúť si zopár obrázkov podobných obr. 8.3. a uvedomiť si pritom, že koeficienty $\alpha(E), \beta(E)$ sú funkciami energie a porozmýšľať o tom, ako sa môže priebeh funkcie $u(x)$ meniť so zmenou energie. Pri istých hodnotách energie teda dostávame riešenie $u(x)$, ktoré je spojité aj so svojou prvou deriváciou v celom intervale $-\infty < x < \infty$ a integrál z $|u(x)|^2$ cez celý interval je konečný. Ak chceme doceliť normovanie $u(x)$ na jednotku, stačí nájdené $u(x)$ násobiť vhodnou konštantou.

Hodnoty energie, ktoré odpovedajú riešeniam spĺňajúcim všetky podmienky, sú hodnotami energie pre viazané, t. j. „kvantové“ stacionárne stavy častice viazanej v pravouhlej jame. Môžeme ich podľa rastúcej veľkosti energie čísovať ako E_1, E_2, \dots atď. a príslušné riešenia $u_1(x), u_2(x), \dots$, sú priestorovou závislosťou príslušných vlnových funkcií. Spolu s časovou závislosťou tieto vlnové funkcie majú tvar

$$\psi_n(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar} u_n(x, t) \quad (38)$$

a sú to tieto stojaté vlny, či čisté harmonické kmity de Broglieho vlny, o ktorých sme už viackrát hovorili.

Tvar $u_1(x), u_2(x), u_3(x)$, ktoré by sme takto dostali, je schematicky znázornený na obr. 8.4.



Obr. 8.4 Tvar priestorovej časti riešení $u_1(x), u_2(x), u_3(x)$ pre pravouhlú potenciálovú jamu

Pri rastúcom V_0 rastie aj koeficient α a tým rýchlejšie klesá $u_n(x)$ mimo oblasti jamy: Pre veľmi veľké hodnoty V_0 bude $u_n(x)$ prakticky nulové mimo jamy a kvôli spojitosti bude nulové aj v bodoch $x = \pm a$. Riešenia vnútri jamy budú potom čisto periodické funkcie a ľahko by sme sa presvedčili o tom, že sú to práve tie stojaté vlny, ktoré sme intuitívne používali v 3. článku 5. kapitoly, keď sme hovorili o elektróne viazanom na úsečku¹⁴¹.

¹⁴¹ Limita $V_0 \rightarrow \infty$ takto zodpovedá častici viazanej v oblasti ohraničenej úplne odrážajúcimi (nepreniknuteľnými) stenami.

8.6 TUNELOVÝ JAV

V klasickej mechanike sa častica nemôže dostať do oblasti, kde by jej celková energia bola menšia ako jej *potenciálna* energia. Vidno to na obr. 8.5, kde sa guľôčka pohybuje rýchlosťou v po rovine a potom sa guľa hore kopcom. Ak zabudneme na trenie, ľahko zo zachovania energie zistíme, že guľôčka sa vykotúľala do kopca do výšky h , pričom platí

$$\frac{1}{2}mv^2 = mgh$$

kde m je hmotnosť guľôčky a g je gravitačné zrýchlenie. V kvantovej mechanike je situácia iná. Ak si všimneme podrobnejšie výpočty v predchádzajúcom článku, zistíme, že pri viazanom stave v pravouhlej jame platí vnútri jame

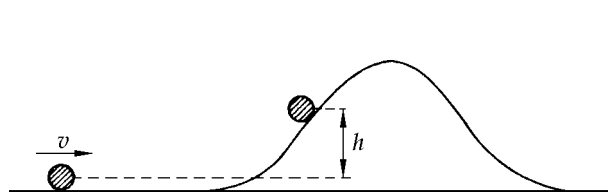
$$E > V(x) = -V_0$$

a mimo jame, t. j. v oblastiach I a III platí

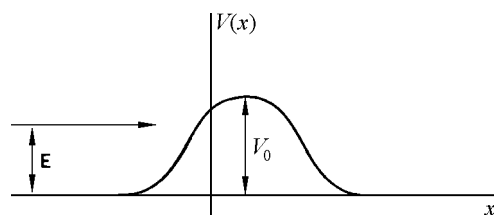
$$E < V(x) = 0$$

ale vlnová funkcia v oblastiach I a III je nenulová. Vieme tiež, že pravdepodobnosť nájsť časticu na intervale dĺžky dx okolo bodu x je rovná $|u(x)|^2 dx$, a teda pri častici viazanej v jame je nenulová pravdepodobnosť nájsť časticu aj v oblasti, kde je – podľa klasickej mechaniky – jej celková energia menšia ako jej potenciálna energia. Častica môže, podľa kvantovej mechaniky, prenikáť aj do takýchto, klasickou mechanikou „zakázaných“ oblastí¹⁴².

Táto skutočnosť má zaujímavé a prekvapujúce dôsledky. Ukazuje sa, že podľa kvantovej mechaniky častica môže prejsť aj oblasťou, v ktorej je jej energia E menšia ako maximálna hodnota V_0 potenciálnej energie $V(x)$. Situáciu vidíme na obr. 8.5b.



Obr. 8.5a Guľôčka sa kotúľa do kopca. Pri zanedbaní trenia sa zastaví vo výške h , ktorá je daná rovnicou (39)



Obr. 8.5b Častica s energiou E môže s istou pravdepodobnosťou prejsť potenciálovou bariérou pri $V_0 > E$

Tento efekt bol skutočne pozorovaný v mnohých situáciách vo fyzike tuhých látok aj v jadrovej fyzike.

Z diskusie v predchádzajúcom článku už vieme, že v takejto „zakázanej“ oblasti vlnová funkcia klesá ako $\exp(-\alpha|x|)$, kde $\alpha = [(2m/\hbar^2)(V - E)]^{1/2}$ a pravdepodobnosti prechodu cez veľmi vysoké a široké bariéry budú preto malé.

8.7 VZŤAH NEURČITOSTI

Schéma klasickej fyziky pre opis sústavy častíc je v princípe jednoduchá. V každom okamihu je *stav* sústavy zadaný jednoznačne súradnicami a rýchlosťami častíc. Ak poznáme hmotnosti častíc, môžeme pri zadaných polohách a rýchlostiach určiť sily, ktoré medzi časticami pôsobia. Druhý Newtonov zákon potom určuje zrýchlenie všetkých častíc a z nich určíme rýchlosti a polohy častíc v nasledujúcom okamihu.

¹⁴² V oblasti klasickej vlnovej fyziky existuje istá analógia takéhoto prenikania. V situácii, keď svetlo dopadá na rozhranie medzi opticky hustejším a redším prostredím, dochádza pri niektorých uhloch dopadu k úplnému odrazu. Vtedy ale vlnenie prechádza aj do určitej malej hĺbky v opticky redšom prostredí. Pozri napr. ŠTRBA, A.: *Všeobecná fyzika III*. Bratislava: ALFA, 1978 alebo R. DITCHBURN: *Light* (u nás známe z prekladu do ruštiny, R. DITČBERN: „Fizičeskaja optika“. Moskva: Nauka, 1965).

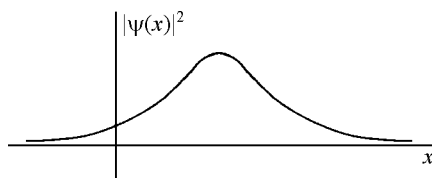
Najjednoduchším prípadom je jediná častica, pohybujúca sa v poli vonkajších síl. Jej stav v danom čase t je určený jednoznačne jej polohou $\mathbf{r}(t)$ a jej hybnosťou¹⁴³ $\mathbf{p}(t)$. Schéma kvantovej mechaniky vychádza z celkom iných princípov. Stav častice v danom čase je daný vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r}, t)$ a časový vývoj vlnovej funkcie je daný Schrödingerovou rovnicou.

Pojmy klasickej fyziky, ako sú poloha a hybnosť častice, majú v kvantovej fyzike už podstatne iný obsah ako mali v klasickej fyzike. V kvantovej fyzike nemožno hovoriť o súčasne zadanej polohe a hybnosti častice a nemožno hovoriť ani o dráhe (trajektórii) častice. Tieto principiálne rozdiely medzi klasicou a kvantovou fyzikou sú výstižne zhrnuté vo *vzťahu neurčitosti*, ktorým sa teraz budeme zaoberať.

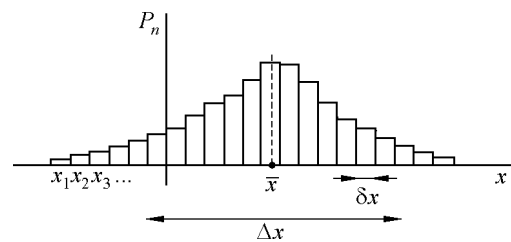
Začneme tým, že sa pokúsime odpovedať na otázku, v akom zmysle a s akou presnosťou môžeme v kvantovej fyzike hovoriť o polohe častice. Predstavme si pre určitost' elektrón pohybujúci sa pozdĺž osi x . Nech je v určitom čase jeho stav daný vlnovou funkciou $\psi(x)$ a druhá mocnina jej absolútnej hodnoty $|\psi(x)|^2$ nech má tvar ako na obr. 8.6a. Pravdepodobnosť pre nájdenie elektrónu v intervale dĺžky δx v okolí bodu x_n je daná výrazom

$$P_n = |\psi(x_n)|^2 \delta x$$

Tieto pravdepodobnosti sú na obr. 8.6b.



Obr. 8.6a Druhá mocnina absolútnej hodnoty vlnovej funkcie elektrónu



Obr. 8.6b Pravdepodobnosti pre nájdenie elektrónu v intervaloch s dĺžkou δx v okolí bodov x_n

Vidíme teda, že nemôžeme hovoriť len tak jednoducho o polohe elektrónu, ale z jeho vlnovej funkcie môžeme dostať iba určité rozloženie pravdepodobnosti. Takéto rozloženia pravdepodobností môžu mať rôzne tvary, ale spravidla môžeme vždy určiť „stred“ \bar{x} a „šírku“ Δx daného rozdelenia pravdepodobnosti. Presné definície tu nepotrebujeme, pod stredom si možno predstaviť takú hodnotu \bar{x} , že súčet pravdepodobností pre $x > \bar{x}$ je $1/2$ a takisto pre $x < \bar{x}$ je súčet pravdepodobností P_n rovný $1/2$.

Šírka rozdelenia Δx je taký interval, že súčet pravdepodobností vnútri neho je rovný určitému zvolenému číslu, napr. $2/3$.

Pozrime sa teraz na to, v akom zmysle môžeme hovoriť o hybnosti častice. Predstavme si najprv, že vlnová funkcia elektrónu $\varphi(x)$ (nemá zatiaľ nič spoločné s obr. 8.6a) má tvar

$$\varphi(x) = C_1 e^{ip_1 x/\hbar} + C_2 e^{ip_2 x/\hbar}$$

Pýtame sa, čo sa stane, keď budeme merať hybnosť častice. Keby $C_2 = 0$, vedeli by sme hneď odpovedať. Vlnová funkcia by vtedy bola rovná $\exp(ip_1 x/\hbar)$, a to je de Broglieho vlna pre časticu s hybnosťou p_1 . Očakávame preto, že by sme určite namerali hodnotu p_1 .

V prípade (40) je situácia zložitejšia. Vidíme ale, že (40) je superpozíciou dvoch de Broglieho vln patriacich hybnostiam p_1, p_2 a očakávali by sme preto, že v stave (40) môžeme namerať len hybnosti p_1, p_2 . Ešte musíme určiť pravdepodobnosť P_1 , s ktorou nameriame p_1 a pravdepodobnosť P_2 , s ktorou nameriame p_2 . Čísla C_1, C_2 v (40) môžu byť kladné, záporné aj komplexné. Pravdepodobnosti P_1, P_2 ale musia byť reálne kladné čísla. Najjednoduchšie je predpokladať, že¹⁴⁴

$$P_1 = k|C_1|^2, \quad P_2 = k|C_2|^2$$

kde k je konštanta, ktorú musíme vybrať tak, aby platilo

$$P_1 + P_2 = 1$$

¹⁴³ Pre voľnú časticu je hybnosť \mathbf{p} viazaná s rýchlosťou \mathbf{v} vzťahom $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, kde m je hmotnosť častice. Zadaním \mathbf{p} určujeme jednoznačne \mathbf{v} a naopak.

¹⁴⁴ Ukazuje sa, že tento predpoklad je správny. Dnes je zabudovaný do základných postulátov kvantovej mechaniky a preverený spolu s celou schémou kvantovej mechaniky v mnohých a mnohých experimentoch.

Všeobecnejším prípadom je vlnová funkcia $\lambda(x)$ daná superpozíciou

$$\lambda(x) = \sum_1^N C_i e^{ip_i x / \hbar} \quad (41)$$

Pri meraní hybnosti v stave opísanom vlnovou funkciou (41) môžeme nájsť len hodnoty p_i , ktoré vystupujú na pravej strane a príslušné pravdepodobnosti P_i budú zas úmerné $|C_i|^2$.

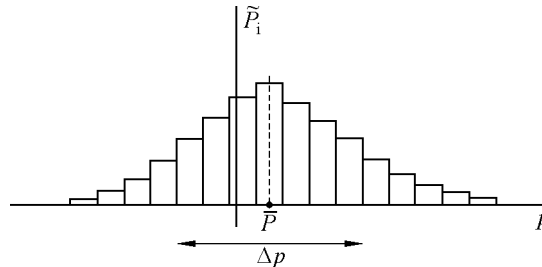
V prípade, že platí

$$\sum_1^N |C_i|^2 = 1$$

bude platiť¹⁴⁵

$$P_i = k |C_i|^2 \quad (42)$$

Vo vyššej matematike (Fourierove rady a Fourierove integrály) sa ukazuje, že v istom zmysle „každú“ vlnovú funkciu môžeme zapísať ako superpozíciu de Broglieho vln (41), ak hodnoty p_i vystupujúce na pravej strane v (41) sú dostatočne husté na osi, ktorú by sme označili „ p “. Túto os môžeme zas rozdeliť na malé intervaly δp a nájsť pravdepodobnosť toho, že pri meraní hybnosti nájdeme hybnosť v intervale dĺžky δp v okolí istého p_i . Takéto pravdepodobnosti by sme mohli označiť \tilde{P}_i . Dostali by sme tak rozdelenie, ktoré je na obr. 8.6c. Podobne ako pri diskusii o obr. 8.6b aj tu môžeme nájsť strednú hodnotu hybnosti \bar{p} a šírku daného rozdelenia pravdepodobnosti Δp .



Obr. 8.6c Pravdepodobnosti pre nájdenie elektrónu v intervale s dĺžkou δp v okolí hodnoty p_i

Veličiny Δx , Δp určujú „nepresnosti“ súradnice a hybnosti v stave s danou vlnovou funkciou a nazývame ich aj „neurčitostami“ polohy a súradnice.

Podrobná analýza problému ukazuje, že platí

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (43)$$

a toto je slávny Heisenbergov vzťah neurčitosti. Objasníme si aspoň kvalitatívne, odkiaľ sa (43) berie. Predstavme si, že chceme superpozíciou rovinných de Broglieho vln „vyrobiť“ vlnový balík s dĺžkou $2l$. Pri vytváraní balíka potrebujeme vlny s rôznymi vlnovými dĺžkami. V strede balíka musia byť vlny vo fáze (vzájomne sa zosilňujú) a na jeho okrajoch musia mať opačné fázy (interferenciou sa rušia). Preto musia byť v balíku zastúpené (aspoň) dve vlny s vlnovými dĺžkami λ_1, λ_2 pričom platí

$$l = n\lambda_1, \quad l = \left(n + \frac{1}{2}\right)\lambda_2 \quad (44)$$

Vidíme teda, že na okraji balíka majú obe vlny opačnú fázu (ak mali v jeho strede rovnakú). Z rovníc (44) máme

$$\frac{l}{\lambda_1} - \frac{l}{\lambda_2} = \frac{1}{2}$$

Po násobení rovnice faktorom $4\pi\hbar$ máme

$$4\pi\hbar \left(\frac{l}{\lambda_1} - \frac{l}{\lambda_2} \right) = 2\pi\hbar$$

¹⁴⁵ Tvrdenie sme tu nedokázali, predchádzajúca diskusia mala len tento postulát kvantovej mechaniky urobiť prijateľným.

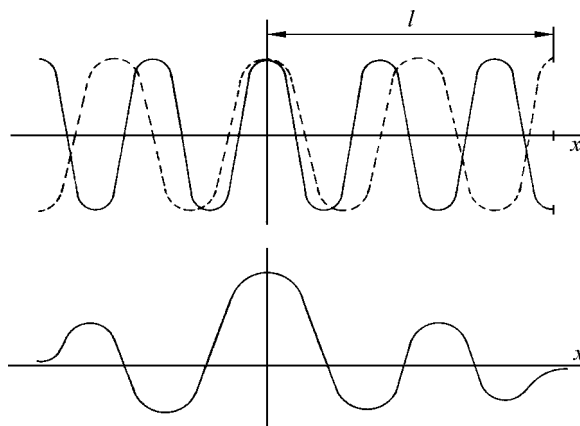
Podľa de Broglieho vzťahu $2\pi\hbar/\lambda_i = p_i$, $i = 1, 2$, (p_i sú hybnosti daných rovinných vln) máme

$$2l(p_1 - p_2) \approx 2\pi\hbar$$

Pritom $2l$ je rozmer balíka, ktorý odpovedá zhruba Δx z predchádzajúcej diskusie a $(p_1 - p_2)$ je toho istého rádu ako Δp – udáva totiž typický rozdiel medzi hybnosťami, ktoré sú podstatné v superpozícii typu (41). Vzťah (45) potom môžeme prepísať ako

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar \quad (46)$$

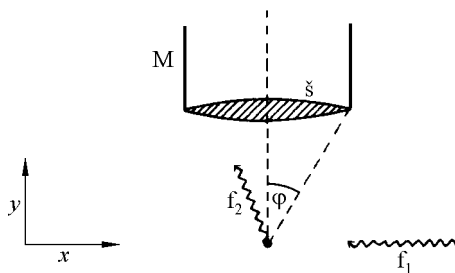
a to je približne rovnaké ako presný vzťah (43). Skladanie vln, o ktorom sme práve hovorili, je na obr. 8.7.



Obr. 8.7 Skladanie dvoch vln na vlnový balík s rozmerom $2l$. V strede balíka sú obe vlny vo fáze, na jeho okrajoch majú opačné fázy. Na časti *a*) sú znázornené obe vlny, ktoré skladáme, časť *b*) ukazuje výsledok. Pri oboch vlnách zakresľujeme iba ich reálnu časť

Vzťah neurčitosti ukazuje tie ohraničenia, ktoré musíme vziať do úvahy, ak chceme hovoriť zároveň o polohe a o hybnosti častice v kvantovej mechanike. Bolo by ale veľmi nepríjemné, keby sa ukázalo, že bez ohľadu na to, čo hovorí kvantová mechanika, na základe experimentu možno poznať súčasne hybnosť aj polohu častice. Znamenalo by to prinajmenšom, že kvantová mechanika je neúplná teória.

Analýza viacerých myšlienkových experimentov však ukazuje, že polohu a hybnosť častice skutočne nemôžeme merať s presnosťou väčšou ako je „povolené“ vzťahom neurčitosti. Uvedieme teraz jeden z najkrajších myšlienkových experimentov tohto typu – Heisenbergov mikroskop, ktorý je na obr. 8.8.



Obr. 8.8 Schéma Heisenbergovho mikroskopu. Polohu elektrónu, ktorý je znázornený veľkou bodkou, meriame pomocou svetla, ktoré sa na elektróne rozptyľuje a dopadá na šošovku \mathcal{S} mikroskopu M , f_1 je dopadajúci, f_2 rozptylený fotón

Polohu elektrónu meriame tak, že na elektrón dopadá žiarenie, ktoré sa na ňom rozptyľuje a dopadá do mikroskopu. Rozlišovacia schopnosť, t. j. presnosť, s ktorou v mikroskope môžeme určiť polohu predmetu, je daná vzťahom

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \varphi} \quad (47)$$

kde λ , je vlnová dĺžka žiarenia a φ je uhol nakreslený na obr. 8.8. Tento vzťah nebudeme odvádzať

podrobnejšie, intuitívne je ale jasné, že polohu nemôžeme určiť presnejšie ako je vlnová dĺžka dopadajúceho žiarenia. Uhol φ sa objavuje v (47) preto, že pri malom φ nevieme odkiaľ do mikroskopu žiarenie prišlo a tým sa znižuje informácia o polohe častice.

Neurčitosť hybnosti elektrónu pochádza z toho, že nevieme, kadiaľ fotón f_2 v mikroskope prešiel. Nepoznáme teda x -ovú zložku hybnosti rozptýleného fotónu. Absolútna hodnota hybnosti fotónu je

$$|p| = \frac{\hbar\omega}{c} = 2\pi \frac{\hbar}{cT} = 2\pi \frac{\hbar}{\lambda} \quad (48)$$

kde ω je uhlová frekvencia žiarenia, T je jeho perióda, c je rýchlosť svetla a λ je vlnová dĺžka žiarenia. Naša neznalosť hybnosti fotónu je teda (pozri obr. 8.8)

$$\Delta p \sim |p| \sin \varphi \sim 2\pi \frac{\hbar}{\lambda} \sin \varphi \quad (49)$$

a toto bude tiež neurčitosť hybnosti elektrónu po rozptyle. Ak urobíme súčin Δx z rovnice (47) a Δp zo vzťahu (49), dostaneme

$$\Delta p \Delta x \sim 2\pi\hbar \quad (50)$$

a vidíme hneď, že súčin $\Delta p \Delta x$ súhlasí s Heisenbergovým vzťahom neurčitosti (43). Pri hlbšom pohľade na Heisenbergov mikroskop vidíme, že podstatnú úlohu tu hrá kvantová povaha žiarenia. Výsledný vzťah (50) podstatne závisí od kvantovomechanického vzťahu (48) medzi vlnovou dĺžkou a hybnosťou fotónu. Myšlienkový experiment takto ukazuje, že kvantová mechanika elektrónov so stavom opísaným vlnovou funkciou a kvantové vlastnosti fotónov tvoria jediný logicky konzistentný celok.

Mnohé ďalšie myšlienkové experimenty a ich analýza pochádzajú z diskusií Bohra a Einsteina na Solvayových kongresoch koncom dvadsiatych rokov¹⁴⁶. Pri všetkých týchto myšlienkových experimentoch sa napokon ukázalo, že principiálne možnosti súčasného experimentálneho určenia polohy a hybnosti elektrónu sú obmedzené Heisenbergovým vzťahom neurčitosti (43).

Zdôraznime ešte raz, že vzťah neurčitosti nehovorí, že elektrón „v skutočnosti“ má presnú hodnotu polohy aj hybnosti a my nie sme schopní ju presne zmerať. Vzťah neurčitosti vyplýva z toho, že stav elektrónu je opísaný vlnovou funkciou a z toho, že vlnovú funkciu treba interpretovať pravdepodobnostne. Vzťah neurčitosti ukazuje tie obmedzenia, ktoré musíme rešpektovať, ak chceme elektrón opisovať pojmami klasickej fyziky.

Napokon ešte poznámku. V Schrödingerovej ceste ku kvantovej mechanike, ktorú sme sledovali, sa princíp neurčitosti objavuje až ako dôsledok celého formalizmu a interpretácie vlnovej funkcie. V Heisenbergovom prístupe bol vzťah neurčitosti zabudovaný do myšlienok, z ktorých vychádzal – objavil sa tam vo forme komutátora matíc priradených súradnici a hybnosti. O tom tu ale hovoriť nebudeme.

Argumenty založené na vzťahu neurčitosti poskytujú často veľmi rýchlu kvalitatívnu orientáciu v danom fyzikálnom probléme, a to, ako sme v 5. kapitole odhadovali energie základných stavov oscilátora a atómu vodíka, vychádzalo z rovnice (5.12), ktorá je len zjednodušenou formuláciou vzťahu neurčitosti.

8.8 O RIEŠENIACH SCHRÖDINGEROVEJ ROVNICE PRE ATÓM VODÍKA. BOHROV MODEL Z HĽADISKA KVANTOVEJ MECHANIKY

Tento článok bude matematicky náročnejší ako predchádzajúce. Pokúsime sa v ňom o zhrnutie tých poznatkov vedúcich ku kvantovej mechanike, ktoré sme už opisovali. Budeme sa v ňom zaoberať dvoma typmi riešení Schrödingerovej rovnice pre atóm vodíka. Prvým bude riešenie pre základný stav. Ukážeme si tvar riešenia a všimneme si, že typický rozmer príslušnej stojatej vlny je naozaj daný Bohrovým polomerom a energia základného stavu sa naozaj rovná E_1 . Druhý typ riešení odpovedá vyšším „Bohrovým stavom“, t. j. stavom fakticky vystupujúcim v Bohrovom modeli atómu vodíka. V týchto stavoch de Broglie vytyčil stojaté elektrónové vlny. Nebudeme sa pokúšať o systematické riešenie Schrödingerovej rovnice a o vyhľadanie všetkých jej riešení. Náš postup bude podstatne jednoduchší. Úvodom

¹⁴⁶ Záznamy o týchto diskusiách dostupné napríklad v anglickom vydaní Bohrových prác.

si ukážeme Schrödingerovu rovnicu vo sférických súradniciach, potom sa presvedčíme o tom, že táto rovnica má riešenia istého typu, a napokon sa budeme zaoberať ich fyzikálnym významom.

Schrödingerova rovnica (bezčasová) pre časticu pohybujúca sa v troch rozmeroch v silovom poli s potenciálovou energiou $V(\mathbf{r})$ je daná vzťahom (30), ktorý s vynechaním indexu n má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) = Eu(\mathbf{r}) \quad (51)$$

kde symbol Δ označuje Laplaceov operátor

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (52)$$

Riešenia (51) odpovedajúce kvantovým (stacionárnym) stavom elektrónu viazanému v atóme vodíka musia nielen spĺňať rovnicu (51), ale musia aj klesať pre $r \rightarrow \infty$ dostatočne rýchlo; aby

$$\int |u(r)|^2 dV < \infty \quad (53)$$

Násobením $u(r)$ vhodnou konštantou môžeme potom prísť k riešeniam, v ktorých sa výraz (53) rovná jednej. Až tieto riešenia odpovedajú jedinej častici viazanej v atóme vodíka. Podmienka (53) kladie aj určité obmedzenia na správanie sa vlnovej funkcie pre $r \rightarrow 0$.

V atóme vodíka má potenciálna energia $V(r)$ tvar

$$V(r) = -\frac{Ke^2}{r}, \quad K \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \quad (54)$$

Pretože potenciálna energia $V(r)$ je sféricky symetrická, závisí iba od $r = |\mathbf{r}|$, je výhodné prepísať celú rovnicu (51) do sférických súradníc, ktoré sú prirodzenejšie a pohodlnejšie pre riešenie úloh so sférickou symetriou. Sférické súradnice r , ϑ , φ sú viazané s karteziánskymi súradnicami x , y , z vzťahmi

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi \\ z &= r \cos \vartheta \end{aligned} \quad (55)$$

Jediným problémom pri prepise rovnice (51) do sférických súradníc je vyjadrenie Laplaceovho operátora Δ vo sférických súradniciach. Výsledok vyzerá na prvý pohľad odstrašujúco

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \quad (56)$$

K tomuto výsledku možno zaujať viacero stanovísk. Možno mu jednoducho uveriť. Jeho odvodenie je naozaj len technickou záležitosťou a žiadny nový fyzikálny pohľad neposkytuje. Možno ho odvodiť mechanicky tak, že prepíšeme parciálne derivácie v karteziánskych súradniciach do sférických súradníc podľa schémy

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

a toto dosadíme do vyjadrenia Laplaceovho operátora podľa (52). Predtým ale treba obrátiť vzťahy (55) na tvar

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \varphi &= \arctg \left(\frac{y}{x} \right) \\ \vartheta &= \arcsin \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \end{aligned} \quad (57)$$

Táto cesta je síce dlhá a nudná, ale vedie k výsledku. Napokon sa možno naučiť niečo o Lamého koeficientoch¹⁴⁷, pomocou ktorých možno rýchlo vyjadriť Laplaceov operátor v ľubovoľných krivočiarych súradniciach.

¹⁴⁷ Pozri napr. J. STRATTON: *Teorie elektromagnetického pole*, Praha : SNTL, 1961

V ďalšom budeme predpokladať, že čitateľ vyjadreniu Laplaceovho operátora (56) uveril, alebo si ho odvodil. Schrödingerova rovnica pre atóm vodíka má potom tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial u}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} \right] \right\} - \frac{Ke^2}{r} u = Eu \quad (58)$$

Teraz sa už môžeme zaoberať riešeniami Schrödingerovej rovnice. Začneme s vlnovou funkciou základného stavu, ktorá je sféricky symetrická. Funkcia $u(r, \vartheta, \varphi)$ v tomto prípade závisí len od r , od ϑ, φ nezávisí. Derivácie u podľa ϑ a podľa φ sú nulové a rovnica (58) sa zjednoduší na

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{Ke^2}{r} u = Eu \quad (59)$$

Z učebníc kvantovej mechaniky je dobre známe, že vlnová funkcia $u(r)$ má jednoduchý exponenciálny tvar

$$u(r) = Ce^{-\beta r} \quad (60)$$

Presvedčíme sa o tom a zároveň nájdeme aj hodnotu konštanty β . Konštanta C sa môže na chvíľu rovnať jednej.

Priamym výpočtom sa presvedčíme o tom, že

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) = -\beta \left[\frac{2}{r} e^{-\beta r} - \beta e^{-\beta r} \right]$$

Po dosadení do (59) máme

$$\frac{\hbar^2 \beta}{2m} \left[\frac{2}{r} e^{-\beta r} - \beta e^{-\beta r} \right] - \frac{Ke^2}{r} e^{-\beta r} = E e^{-\beta r}$$

Spoločným faktorom $\exp(-\beta r)$ delíme celú rovnicu a dostaneme

$$\left[\frac{\hbar^2 \beta}{m} - Ke^2 \right] \frac{1}{r} = \left[E + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \right]$$

Ak má táto rovnica platiť pre každé r , musia byť obidva výrazy v hranatých zátvorkách nulové. Z výrazu, ktorý je pri $1/r$, určíme β

$$\beta = \frac{mKe^2}{\hbar^2} \equiv \frac{1}{a_1}$$

kde $a_1 = \hbar^2/mKe^2$ je Bohrov polomer. Z druhého určíme hodnotu energie

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{mKe^2}{\hbar^2} \right)^2 \equiv E_1$$

kde E_1 je skutočná energia základného stavu atómu vodíka. Vlnová funkcia základného stavu má teda tvar

$$u(r) = Ce^{-r/a_1} \quad (61)$$

Odtiaľ vidno, že $u(r)$ je „veľké“ pri $r < a_1$ a rýchlo klesá, ak r rastie na niekoľkonásobok Bohrovho polomeru.

V Bohrovom modeli atómu vodíka sa elektrón pohyboval po kruhovej dráhe podľa zákonov klasickej mechaniky. Predpokladajme, že sa pohybuje v rovine (x, y) . Priemet jeho momentu hybnosti m na os z sa bude rovnať jeho momentu hybnosti l .

Pri opise atómu vodíka podľa kvantovej mechaniky budú týmto stavom zodpovedať tie stavy, v ktorých pre kvantové čísla platí $m = \pm l$. Budeme ich nazývať Bohrove stavy (aj keď sa často nazývajú Rydbergove stavy).

Riešenia Schrödingerovej rovnice zodpovedajúce Bohrovým stavom sú o čosi komplikovanejšie. Pri ich diskusii budeme postupovať tak, že ich najprv vypíšeme explicitne, potom prediskutujeme kvalitatívne ich tvar a až potom sa presvedčíme o tom, že sú skutočne riešeniami Schrödingerovej rovnice.

Tieto riešenia majú tvar

$$u(r, \vartheta, \varphi) = Cr^l e^{-\beta r} \sin^l \vartheta \cos l\varphi \quad (62)$$

pričom

$$\beta = \frac{1}{(l+1)a_1} \quad (63)$$

$$E = -\frac{m(Ke^2)^2}{2\hbar^2(l+1)^2} \quad (64)$$

Začneme s tvarom vlnovej funkcie $u(r, \vartheta, \varphi)$, ktorý je daný vzťahom (62). Faktor $\sin \vartheta$ je malý všade okrem tých hodnôt ϑ , pre ktoré $\sin \vartheta \approx 1$. Tieto ϑ odpovedajú uhlom ϑ blízkym k $\pi/2$. Vo sférických súradniciach hodnoty $\vartheta \approx \pi/2$ odpovedajú rovine (x, y) . Vlnové funkcie (62) budú teda pomerne veľké len v tesnom okolí roviny (x, y) tak, ako to bolo s dráhami povolenými Bohrovým modelom.

Faktor $r^l e^{-\beta r}$ má maximum pri tom r , pre ktoré sa derivácia tohto výrazu rovná nule. Ľahko sa presvedčíme o tom, že je to pri

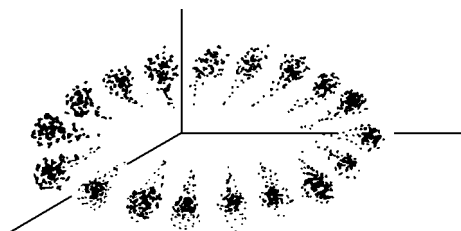
$$r = \frac{l}{\beta} = l(l+1)a_1$$

Pre veľké l máme približne

$$r = (l+1)^2 a_1$$

čo odpovedá Bohrovmu polomeru dráhy s $n = l + 1$ v Bohrovom modeli atómu vodíka. Energia vo vzťahu (64) tiež odpovedá energii stavu s $n = l + 1$ v Bohrovom modeli. Faktor $\cos l\varphi$ sa periodicky mení s a_1 , pričom na obvod kružnice s polomerom r pripadá práve l „vlnových dĺžok“.

Keby sme si znázornili v priestore hodnoty $|u(r, \vartheta, \varphi)|^2$, dostali by sme niečo ako na obr. 8.9, ktorý zodpovedá $l = 9$. Tieto vlnové funkcie sú veľmi blízke de Broglieho intuitívnej predstave o pôvode Bohrovej kvantovej podmienky (tretia podmienka alebo tretí postulát v Bohrovom modeli).



Obr. 8.9 Druhá mocnina absolútnej hodnoty vlnovej funkcie danej rovnicami (67) a (68) pri $l = 9$

Pripomeňme si, že podľa de Broglieho predstavy vzniká stojatá vlna v atóme vtedy, ak sa elektrón pohybuje po dráhe s polomerom r a platí

$$\frac{2\pi r}{\lambda} = n \quad (65)$$

Pretože hybnosť častice je viazaná s vlnovou dĺžkou λ , de Broglieho vlny vzťahom

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$$

zo (65) platí

$$pr = n\hbar$$

Po zápise $p = mv$ odtiaľ dostávame Bohrovu tretiu podmienku $mvr = n\hbar$.

V Bohrových stavoch opísaných vlnovou funkciou (62) platí vďaka faktoru $\cos l\varphi$ a vďaka tomu, že vlnová funkcia je sústredená do oblasti $\vartheta \approx \pi/2$, $r = (l+1)^2 a_1$ de Broglieho podmienka (65), pričom $n = 1$.

Takto z riešení Schrödingerovej rovnice vidno, prečo „pracoval“ Bohrov model a ako de Broglie správne vytušil príčinu vedúcu k tretej podmienke Bohrovho modelu.

Keď sme si už to lepšie zjedli, ostáva nám len suchý chlebič – presvedčiť sa o tom, že (62) je skutočne riešením Schrödingerovej rovnice (58). Aby rovnice neboli príliš dlhé, rozdelíme výpočet na niekoľko častí. Najprv zavedieme symbol

$$\Delta_{\vartheta, \varphi} \equiv \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (66)$$

a riešenie Schrödingerovej rovnice (62) zapíšeme v tvare

$$u(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi)$$

kde

$$R(r) = Cr^l e^{-\beta r} \quad (68a)$$

$$Y(\vartheta, \varphi) = \sin^l \vartheta \cos l\varphi \quad (68b)$$

Pomocou (66) prepíšeme Schrödingerovu rovnicu (58) na tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial RY}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta, \varphi} RY \right\} - \frac{Ke^2}{r} RY = ERY \quad (69)$$

Zdĺhavým, ale priamym výpočtom sa presvedčíme o tom, že $\Delta_{\vartheta, \varphi}$

$$\Delta_{\vartheta, \varphi} Y(\vartheta, \varphi) = -l(l+1)Y(\vartheta, \varphi) \quad (70)$$

a týmto sa problém podstatne zjednoduší, lebo (69) bude mať tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial RY}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} RY \right\} - \frac{Ke^2}{r} RY = ERY \quad (71)$$

z ktorého vypadli všetky derivácie podľa ϑ, φ . Vzhľadom na derivovanie podľa r sa funkcia $Y(\vartheta, \varphi)$ správa ako konštanta, takže v prvom člene v (71) môžeme napísať

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial RY}{\partial r} \right) = Y \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right)$$

a potom (71) vydeliť funkciou $Y(\vartheta, \varphi)$. Tým dostaneme rovnicu obsahujúcu len funkciu $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R \right\} - \frac{Ke^2}{r} R = ER \quad (72)$$

Ak do tejto rovnice dosadíme $R(r)$ v tvare (68a), po jednoduchých úpravách dostaneme

$$-\frac{2\beta(l+1)}{r} + \beta^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ke^2}{r} \right) = 0$$

Ak sa má táto rovnica rovnať nule, pre každé r musí platiť

$$\beta^2 + \frac{2m}{\hbar^2} E = 0 \quad (73)$$

$$-2\beta(l+1) + \frac{2m}{\hbar^2} Ke^2 = 0 \quad (74)$$

Z druhej z nich určíme β

$$\beta = \frac{mKe^2}{\hbar^2} \frac{1}{l+1} = \frac{1}{a_1(l+1)}$$

kde a_1 je Bohrov polomer. Po dosadení tejto hodnoty β do (73) nájdeme pre energiu vyjadrenie (64).

Riešenia typu (62) sa v učebniciach kvantovej mechaniky zväčša neuvádzajú explicitne, ale ľahko ich dostaneme ako superpozíciu známych riešení označovaných ako $\psi_{l+1,l,+l}$, $\psi_{l+1,l,-l}$ kde sme kvantové čísla označovali štandardne ako n , l , m , kde n je hlavné, l orbitálne a m magnetické kvantové číslo.

Stavy v Bohrovom modeli atómu charakterizované jediným kvantovým číslom n zodpovedajú špeciálnym riešeniam Schrödingerovej rovnice. Šťastnou zhodou okolností je spektrum energií v Bohrovom modeli identické so spektrom všetkých riešení Schrödingerovej rovnice pre atóm vodíka. Je to spôsobené tým, že v čisto coulombovskom potenciáli závisí energia len od hlavného kvantového čísla a nezávisí od orbitálneho kvantového čísla l . Vo sféricky symetrickom potenciáli odlišnom od Coulombovho to už nie je pravda. Toto sa stáva napr. pri pohybe určitého elektrónu v zložitejšom atóme, kde vplyv ostatných elektrónov môžeme približne opísať ako tienenie poľa jadra. Energie stavov už závisia od kvantových čísel n , l a aj preto pokusy o použitie Bohrovho modelu pre viacelektrónové atómy skončili neúspešne.

8.9 MAX BORN, KRSTNÝ OTEC KVANTOVEJ MECHANIKY

Max Born sa narodil 11. decembra 1882 v rodine lekára – univerzitného profesora vo Vratislavi. Patril medzi tých fyzikov „staršej generácie“, ktorí boli pri zrode teórie relativity a starej kvantovej teórie, ale čoskoro pochopili, že neprotirečivý opis zákonitostí mikrosвета nevznikne zdokonaľovaním pôvodných Bohrových postulátov (zavádzaním eliptických dráh elektrónov a relativistickými korekciami), ale vybudovaním novej teórie. V tejto otázke sa názorovo približoval Nielsovi Bohrovi. Naproti tomu Bornove postoje vo fyzike mikrosвета vrhali tieň nedorozumenia na jeho trvalý priateľský vzťah k Einsteinovi¹⁴⁸.

Bornovu schopnosť prijímať a rozvíjať aj v relatívne staršom veku od základu nové myšlienky, možno pripísať dvom okolnostiam. Po prvé – podobne ako Bohr – ho filozofický podtext vedy vždy zaujímal viac ako špeciálne výsledky¹⁴⁹.

Toto hľadisko ho podnecovalo, aby sa aktívne zúčastnil na vytváraní nového fyzikálneho obrazu sveta.

Druhá okolnosť spočívala v tom, že vždy vedel, kde sa skutočne robí a rodí veda. Keď sa rozhodol študovať matematiku, povedali mu, že Mekkou matematiky je Göttingen a že tam nájde troch prorokov: Felixu Kleina, Davida Hilberta a Hermanna Minkowského. Born šiel študovať do Göttingenu a s poslednými dvoma sa aj zblížil. Naučil sa od nich nekonvenčnému prístupu k matematike, ktorý mu neskoršie veľmi prospel. Keď sa potom rozhodol študovať teoretickú fyziku, spoznal na rozdiel od mnohých iných, význam Einsteinových prác o teórii relativity a kvantovej teórii.

Počas prvej svetovej vojny sa Born v Berlíne zblížil s Albertom Einsteinom, často sa stretávali, poriadali rodinné husľové koncerty. Max Born bol vlastne Einsteinovým dôverníkom v období, keď sa rodila všeobecná teória relativity.

Pokiaľ ide o kvantovú teóriu, Max Born nadviazal na Einsteinovu prácu z roku 1907 a spolu s Theodorom Kármánom (1881–1963) vypracoval teóriu, ktorá vystihovala správanie sa kryštalických tuhých látok pri nízkych teplotách. Borna pokladáme za jedného zo zakladateľov modernej fyziky tuhých látok.

V roku 1919 odišiel Born z Berlína do Frankfurtu nad Mohanom, kde prevzal profesúru po Maxovi Lauem. Tu sa pod Bornovým patronátom a možno povedať aj mecenášstvom uskutočnil Sternov-Gerlachov pokus. Walther Gerlach v roku 1979 (niekoľko týždňov pred smrťou) spomínal, ako im Born poskytol finančné prostriedky, ktoré získal z prednášok o teórii relativity, aby mohli uskutočniť svoj pokus. Po Bornovej intervencii im potom Einstein obstaral peniaze na zakúpenie silného magnetu.

¹⁴⁸ Albert Einstein, ktorý v roku 1917 ako prvý uplatnil myšlienku náhodnosti pri určovaní smeru fotónu vyžiareného z atómu a časového okamihu tohto aktu, neprijal do svojej smrti v roku 1955 pravdepodobnostnú interpretáciu kvantovej mechaniky. Treba však pripomenúť, že spory, ktoré mal s Bornom, Bohrom a prívržencami kodanskej školy, neovplyvnili nijako vzťahy vzájomného rešpektu medzi vedúcimi fyzikmi prvej polovice nášho storočia.

¹⁴⁹ Pozri BORN, M.: *My life and my views* (Môj život a moje názory), New York : Charles Scribner's sons, 1968.

V roku 1921 prijal Born miesto profesora teoretickej fyziky v Göttingene. Tu si pozval na spoluprácu Jamesa Francka, ktorý v roku 1914 spolu s G. Hertzom experimentálne potvrdil Bohrovu podmienku pre frekvencie žiarenia vysielaného atómami pri prechode z jedného kvantového stavu do druhého.

Rovnako šťastnú ruku ako pri vyhľadávaní učiteľov a spolupracovníkov mal Born aj pri výbere svojich žiakov a asistentov. V Göttingene spolupracoval s nastupujúcou generáciou teoretických fyzikov, menovite s Wernerom Heisenbergom, Wolfgangom Paulim a Pascualom Jordanom¹⁵⁰.

V roku 1924 uverejnil Max Born článok s nadpisom *Kvantová mechanika*. Tento termín používal aj na seminároch a napokon sa všeobecne prijal po publikovaní Heisenbergovej maticovej mechaniky a Schrödingerovej vlnovej mechaniky. V tomto zmysle je Max Born krstným otcom kvantovej mechaniky.

Max Born v spolupráci s Pascualom Jordanom a potom v spoluautorstve s Heisenbergom a Jordanom vypracoval matematickú teóriu maticovej mechaniky.

Hoci Schrödinger sám poukázal na ekvivalenciu maticovej a vlnovej mechaniky, jeho interpretácia kvantovej mechaniky sa diametrálne rozchádzala s interpretáciou v „práci troch mužov“ („Dreimännerarbeit“)¹⁵¹.

Schrödinger pokladal elektrón za akúsi vlnu „rozmazanú“ okolo jadra, zatiaľ čo Heisenberg pokladal opis mikročastíc v priestore a v čase za nevhodný. Max Born v článku *Kvantová mechanika zrážkových procesov*¹⁵² uverejnil novú, pravdepodobnostnú interpretáciu kvantovej mechaniky, o ktorej sme písali v tejto kapitole.

Interpretácia kvantovej mechaniky, ktorú podnikol Born v roku 1926, stala sa oficiálnou a dostala názov ortodoxná interpretácia.

V roku 1933 Born emigroval do Veľkej Británie. V Cambridgei napísal učebnicu atómovej fyziky, ktorá vyšla vo viacerých vydaniach v rôznych jazykoch. V roku 1936 prevzal profesúru po Charlesovi Galtonovi Darwinovi v Edinburhu, kde zotrval do roku 1953. Nobelovu cenu mu udelili v roku 1954.

Nezúčastnil sa na anglo-americkom atómovom projekte, lebo ako napísal Clarkovi, „moji kolegovia vedeli, že som bol proti tomu, aby som sa zúčastnil na vojenskej službe takéhoto druhu, ktorá sa javila takou hrôzostrašnou“¹⁵³. V roku 1953 odišiel do dôchodku, presídlil do NSR, kde žil v Bad Pyrmont. Zomrel 5. januára 1970 v Göttingene.

¹⁵⁰ Pascual Ernst Jordan sa narodil 18. októbra 1902 v Hannoveri. Študoval v Göttingene a stal sa Bornovým asistentom. Neskôr bol profesorom v Hamburgu. Born veľmi zazlieval Jordanovi jeho postoj za nacizmu a odmietol sa s ním po II. svetovej vojne stretnúť.

¹⁵¹ Pod týmto názvom vošiel do dejín Bornov, Heisenbergov a Jordanov spoločný článok.

¹⁵² Zeitschrift für Physik 38 (1926), 83.

¹⁵³ CLARK, R. W.: *Albert Einstein*. Esslingen : Bechtle, 1974.

PRÍLOHA 1.

HEISENBERGOVA CESTA KU KVANTOVEJ MECHANIKE

P1.1 ÚVOD

V tejto kapitole budeme sledovať historicky najstaršiu cestu k formulácii kvantovej mechaniky. Základné myšlienky sa objavili v Heisenbergovej práci¹⁵⁴ z roku 1925. Skoro boli rozpracované Heisenbergom, Bornom, Jordanom, Paulim, Diracom a ďalšími do logicky konzistentnej schémy známej ako maticová mechanika. Cestu, ktorá viedla k maticovej kvantovej mechanike sledovali v troch centrách: v Mníchove, v Göttingene a v Kodani. V uvedenom poradí tu vybudovali svoje školy Arnold Sommerfeld, Max Born a Niels Bohr. Spôsob myslenia a práce boli v mnohom rovnaké, ale v mnohom sa odlišovali. Sommerfeld a Born nezapreli svoje matematické vzdelanie. Viedli svojich žiakov k tvrdej matematickej práci. Heisenberg vo svojich spomienkach uvádza Sommerfeldovho ponaučenie: „Keď králi stavajú, fúrikári musia fúrikovať“, ktoré nabádalo mladých fyzikov ku skromnosti a pracovitosti. V Mníchove i v Göttingene sa všetko prekladalo do matematického jazyka a výpočty sa robili dôsledne, vrátane poslednej bodky nad *i*. Naproti tomu Bohr bol predovšetkým fyzikom. Sústreďoval sa viac na problém ako vybudovať pojmový aparát novej fyziky, ktorá by vystihovala „podivné“ vlastnosti sveta atómov. Stalo sa aj to, že v Bohrových odborných článkoch sa analyzovali fyzikálne myšlienky, ale nebol v nich ani jeden matematický vzťah.

Heisenbergovým šťastím bolo to, že prešiel všetkými tromi školami. Študoval v Mníchove a potom pôsobil striedavo v Göttingene a v Kodani. Vo svojich spomienkach uvádza, že Kodaň mu dala najviac – otvorené diskusie o fyzikálnej podstate základných problémov. V Mníchove, v Göttingene i v Kodani sa Heisenberg stretával s priateľom, ktorý mu bol názorovo blízky i keď býval často jeho nekompromisným kritikom. Bol to Wolfgang Pauli. Vďaka všetkým týmto okolnostiam uplatnil sotva 24-ročný Heisenberg svoje mimoriadne nadanie a húževnatosť a v roku 1925 položil základy kvantovej mechaniky.

Pri formulácii kvantovej mechaniky viedli Heisenberga dva princípy: princíp pozorovateľnosti a princíp korešpondencie. Podľa princípu pozorovateľnosti majú do základov teórie vstupovať len veličiny, ktoré sú priamo pozorovateľné.

V istom zmysle tento princíp použil pri budovaní špeciálnej relativity Albert Einstein. Pretože éter ako absolútna súradná sústava bol nepozorovateľný, bol vylúčený z teórie a všetky inerciálne súradné sústavy sa stali plne rovnoprávnymi (princíp relativity). Spolu s princípom konštantnej rýchlosti svetla toto boli myšlienky, ktoré boli základom špeciálnej teórie relativity. Princíp pozorovateľnosti, aj keď ho Einstein tak nenazval, tu pomohol zbaviť sa starších predstáv o absolútnom priestore a čase.

Einstein – najmä v zrelom veku – nebol zástancom princípu pozorovateľnosti. V neskoršej besede s Heisenbergom zastával stanovisko, že práve teória rozhoduje o tom, ktoré veličiny sú pozorovateľné a Heisenberg toto stanovisko neskôr prijal.

Myšlienka vychádza z toho, že nejestvujú žiadne „priame“ výsledky experimentov. Interpretácia každého experimentálneho výsledku vychádza z pojmov, predstáv a zákonov existujúcich alebo vytvárajúcich sa teórii a v tomto zmysle je teória základom pre interpretáciu výsledkov.

Poznamenajme, že praotcom princípu pozorovateľnosti bol Ernst Mach. Podľa neho sú experimentálne výsledky primárnymi stavebnými kameňmi fyzikálneho poznania a teória je len na to, aby ich nejako utriedila. Ak vezmeme Machove názory do písma, dostaneme filozofiu, ktorá nie je udržateľná. Ak ich ale vezmeme ako „návod“ na to, čo robiť v „krízových situáciách“ dostaneme odporúčanie, ktoré hovorí zhruba toto: „Ak je fyzika v kríze, môže k jej prekonaniu viesť to, že základné pojmy teórie budú

¹⁵⁴O kvantovoteoretickej reinterpretácii kinematických a mechanických vzťahov, Zeit. f. Physik 33 (1925) 879-893. Článok prišiel do redakcie 29. júla 1925 a vyšiel 18. septembra 1925

blízko k experimentálnym faktom“. Tak postupoval Einstein pri budovaní špeciálnej teórie relativity i Heisenberg pri vzniku kvantovej mechaniky.

Začiatkom dvadsiatych rokov si Heisenberg, Pauli, Bohr a ďalší začali uvedomovať, že predpoklad, podľa ktorého sa elektróny v atómoch pohybujú po určitých trajektóriách, nie je priamo zdôvodnený experimentom a je v skutočnosti prekážkou pri budovaní novej teórie. Pripomeňme tu znova Rutherfordovu otázku k Bohrovmu modelu atómu vodíka: „Odkiaľ vie elektrón nachádzajúci sa v určitom stacionárnom stave, do ktorého stavu má preskočiť?“

Vznikla prirodzene otázka, akými novými veličinami treba opisovať elektrón v atóme. Priamo pozorovateľnými veličinami boli frekvencie rôznych spektrálnych čiar a príslušné intenzity. Heisenberg sa preto snažil zaviesť namiesto trajektórie elektrónu veličiny, ktoré tesne súviseli s frekvenciami a intenzitami spektrálnych čiar.

Čiarový charakter spektier atómov bol celkom všeobecným javom. Rovnako všeobecne bolo prijímané aj Bohrovo vysvetlenie čiarových spektier. Podľa neho v atómoch existujú isté stacionárne stavy s diskretnými hodnotami energie E_n . Pri prechode atómu zo stacionárneho stavu s energiou E_n do stavu s energiou E_m sa uvoľní jediný fotón, ktorého energie je rovná $E_n - E_m$. Pozorovateľné veličiny teda súvisia s **prechodmi** medzi stacionárnymi stavmi. Podľa základnej Heisenbergovej myšlienky nemáme teda hovoriť o trajektórii $x(t)$ elektrónu, ale len o veličine $x_{nm}(t)$, spojenjej s prechodom $n \rightarrow m$. Rovnako nemáme hovoriť o hybnosti $p(t)$ elektrónu „ako takej“, ale len o „tabuľke hybnosti“ $p_{nm}(t)$ spojenjej s prechodom $n \rightarrow m$. Potrebujeme teda vybudovať teóriu, ktorej základnými veličinami by boli „tabuľky“ čísel $x_{nm}(t)$, $p_{nm}(t)$. Okrem toho by sme sa mali snažiť zachovať z klasickej fyziky to, čo sa zachovať dá.

Metodickým východiskom pri týchto úvahách bol Bohrov princíp korešpondencie a práce Bohra, Kramersa a Heisenberga o intenzitách spektrálnych čiar, vychádzajúce z toho princípu. Vo svojej prvej práci o (maticovej) kvantovej mechanike Heisenberg začal celkom prirodzene s analýzou najjednoduchšieho systému – lineárneho harmonického oscilátora a s veličinami $x_{nm}(t)$, $p_{nm}(t)$ opisujúcimi vyžarovanie a pohlcovanie fotónov týmto systémom. V nasledujúcom odseku sa preto budeme zaoberať so žiarením nabitej častice, kmitajúcej ako lineárny harmonický oscilátor.

V odseku 9.3 stále zostaneme v klasickej fyzike a budeme hovoriť o žiarení klasickej nabitej častice, ktorá koná jednorozmerný periodický pohyb, ale nie je to presne pohyb lineárneho harmonického oscilátora. Pri prvom čítaní tejto kapitoly sa čitateľ môže zoznámiť so vzťahmi (1) a (2) a potom skočiť až na začiatok odseku 9.4, kde hovoríme o Heisenbergovom kvantovo-mechanickom opise lineárneho harmonického oscilátora.

P1.2 ŽIARENIE NABITEJ ČASTICE KMITAJÚCEJ AKO LINEÁRNY HARMONICKÝ OSCILÁTOR – PODĽA KLASICKEJ FYZIKY

Najjednoduchšou sústavu vysielajúcou žiarenie je nabitá častica, ktorá v jednom smere osciluje okolo svojej rovnovážnej polohy. Ak častica má náboj q a jej trajektória je daná vzťahom

$$x(t) = X \cos(\omega t) \quad (1)$$

potom energia, ktorú častica vyžiari za jednotku času je daná výrazom

$$W = \frac{2}{3c^3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \omega^4 X^2 \quad (2)$$

Odvodenie tohto vzťahu je pomerne zložitá a možno ho nájsť v každej učebnici teórie elektromagnetického poľa. To ale neznamená, že čitateľ tu musí prestať čítať a pokračovať až po štúdiu príslušných učebníc. Vzťah (2) totiž možno získať veľmi jednoducho (až na konštantu 2/3) pomocou rozmerovej analýzy a troškou intuície.

Náboj, ktorý sa pohybuje rovnomerne priamočiario nevyžaruje elektromagnetické vlny. Vidno to z toho, že môžeme prejsť do sústavy, v ktorej je náboj v pokoji. Tam bude existovať len elektrostatické pole a žiadne vyžarovanie. A ak niet vyžarovania v jednej sústave, nebude ho ani v iných. Vyžarovať bude len náboj, ktorý sa pohybuje s nenulovým zrýchlením voči inerciálnej sústave. Zrýchlenie častice, ktorá sa pohybuje podľa vzťahu (1) je

$$a(t) = -\omega^2 X \cos(\omega t) \quad (3)$$

Intenzita elektrického poľa E vyžarovaného nábojom bude úmerná náboju q a zrýchleniu $a(t)$. Energia W žiarenia vysielaného za jednotku času bude úmerná druhej mocnine intenzity, teda

$$W \sim q^2 \omega^4 X^2$$

Faktor $\cos^2(\omega t)$ sme vynechali, pretože pod W už rozumieme veličinu ustrednenú v čase, takže z $\cos^2(\omega t)$ ostáva už len jeho stredná hodnota rovná $1/2$. Tento vzťah treba doplniť tak, aby obe strany mali rovnaký rozmer. Náboj q má rozmer C (coulomb), ktorý v rozmere pre W nevystupuje. Preto v sústave SI náboj q vstupuje do konečného vzťahu v kombinácii $q^2/4\pi\epsilon_0$, kde už rozmer C nemáme. Navyše vieme, že pri výpočtoch intenzity elektrického poľa spolu s nábojom q spravidla vystupuje aj faktor $1/(4\pi\epsilon_0)$. Takto máme

$$W \sim \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \omega^4 X^2$$

Teraz sa pozrime na rozmer veličín na jednej a na druhej strane. Rozmer W je (energia)/(čas), teda Js^{-1} . Jednotlivé veličiny na pravej strane majú rozmer: $[q^2/4\pi\epsilon_0] = \text{Jm}$, $[\omega] = \text{s}^{-1}$, $[X^2] = \text{m}^2$. Pravá strana má preto rozmer $\text{Js}^{-1}(\text{ms}^{-1})^3$. Aby rozmery oboch strán boli rovnaké, musíme pravú stranu ešte predeliť treťou mocninou veličiny s rozmerom rýchlosti. V rovniciach pre elektromagnetické pole vystupuje jediná veličina s rozmerom rýchlosti – je to rýchlosť svetla vo vákuu c . Takto v sústave SI máme

$$W \sim \frac{1}{c^3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \omega^4 X^2$$

Tento vzťah sa už líši len číselným faktorom $2/3$ od správneho vzťahu (2). Tento číselný faktor, prirodzene, nemôžeme určiť rozmerovou analýzou a kvalitatívnymi úvahami.

Poznamenajme ešte, že vzťah (1) niekedy zapisujeme v tvare

$$x(t) = X_1 e^{i\omega t} + X_{-1} e^{-i\omega t} \quad (4)$$

kde

$$X_1 = \frac{X}{2}, \quad X_{-1} = \frac{X}{2}$$

Pri tejto zámene potrebujeme využiť len známy vzťah

$$\cos \varphi = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2$$

Energia vyžarovania oscilátora je potom daná vzťahom

$$W = \frac{8}{3c^3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \omega^4 |X_1|^2 \quad (5)$$

P1.3 ŽIARENIE NABITEJ ČASTICE PRI PERIODICKOM POHYBE – PODĽA KLASICKEJ FYZIKY

V tomto odseku trocha zovšeobecníme predchádzajúce výsledky. Budeme predpokladať, že nabitá častica koná síce periodický pohyb s periódou T , ale pohyb nie je pohybom jednoduchého oscilátora opísaného rovnicou (1). Výchylka $x(t)$ nabitej častice z rovnovážnej polohy je v tomto prípade periodickou funkciou času s periódou T . Matematická teória opisu takéhoto pohybu hovorí, že môžeme zaviesť frekvencie

$$\omega_1 = \frac{2\pi}{T}, \quad \omega_2 = 2\frac{2\pi}{T} = 2\omega_1, \quad \omega_3 = 3\omega_1, \dots \quad (6)$$

a zapísať funkciu $x(t)$ ako súčet členov

$$x(t) = (X_1 e^{i\omega_1 t} + X_{-1} e^{-i\omega_1 t}) + (X_2 e^{i\omega_2 t} + X_{-2} e^{-i\omega_2 t}) + (X_3 e^{i\omega_3 t} + X_{-3} e^{-i\omega_3 t}) + \dots \quad (7)$$

Prvý člen je tu úplne rovnaký ako výraz vo vzťahu (4) a ostatné členy v (7) sú len „vyššie harmonické“. Ak položíme pre celé číslo k , $k > 0$

$$X_k = |X_k| e^{i\alpha_k}, X_{-k} = |X_k| e^{-i\alpha_k} \quad (8)$$

môžeme (7) prepísať ako

$$x(t) = 2|X_1| \cos(\omega_1 t + \alpha_1) + 2|X_2| \cos(\omega_2 t + \alpha_2) + 2|X_3| \cos(\omega_3 t + \alpha_3) + \dots \quad (9)$$

čo je zas súčet amplitúdy základného kmitu s uhlovou frekvenciou ω_1 a amplitúd vyšších harmonických s frekvenciami $\omega_2, \omega_3, \dots$

Intenzita vyžarovania (energia za jednotku času) lineárneho harmonického oscilátora kmitajúceho podľa (1), v označení (4) je daná výrazom (5). Ak k základnému kmitu pridáme vyššie harmonické podľa výrazu (7) pribudnú tieto vyššie harmonické aj do výrazu (5) a dostaneme tak

$$W = \frac{8}{3c^3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \{\omega_1^4 |X_1|^2 + \omega_2^4 |X_1|^2 + \omega_3^4 |X_1|^2 + \dots\} \quad (10)$$

Tento vzťah je všeobecným opisom intenzity žiarenia klasickej častice pohybujúcej sa po určitej klasickej trajektórii. Prvý člen na pravej strane rovnice (10) odpovedá žiareniu s kruhovou frekvenciou ω_1 , druhý člen s kruhovou frekvenciou ω_2 , tretí s kruhovou frekvenciou ω_3 , atď.

Základná Heisenbergova myšlienka, ku ktorej sa ešte vrátíme neskôr bola v podstate jednoduchá. Predstavme si, že náš systém je sa len málo líši od lineárneho harmonického oscilátora. Kruhové frekvencie ω_k potom približne spĺňajú rovnice (6). Pozrime sa ale na problém z kvantového a nie z klasickeho hľadiska. Systém podľa tohto už nevysiela klasicke žiarenie ale fotóny. Fotón s kruhovou frekvenciou ω_k rovnajúcou sa približne $k\omega_1$ má energiu $\hbar\omega_k$, teda približne $k\hbar\omega_1$. Susedné energetické hladiny harmonického oscilátora sa ale líšia o $\hbar\omega_1$. Ak sa vyžiari fotón s energiou $k\hbar\omega_1$, potom to musí znamenať prechod sústavy o k hladín nižšie a veličiny X_k v rovniciach ako (9) a (10) sa musia zmeniť na $X_{n,n-k}$, čo už bude kvantovomechanická veličina odpovedajúca prechodu z hladiny n na hladinu $n-k$. Toto bola základná Heisenbergova myšlienka. Vrátime sa k nej ešte podrobnejšie.

PI.4 HEISENBERGOVO KVANTOVANIE LINEÁRNEHO HARMONICKÉHO OSCILÁTORA A JEHO ŽIARENIA

V predchádzajúcich dvoch odsekoch sme hovorili o tom, aká je intenzita vyžarovania klasickej nabitkej častice pohybujúcej sa po určitej trajektórii $x(t)$.

V kvantovej mechanike je ale situácia iná. Z experimentu poznáme kruhové frekvencie žiarenia (čiarové spektrum) odpovedajúce prechodom medzi jednotlivými stacionárnymi stavmi. Pri prechode zo stavu s energiou E_n do stavu s energiou E_m príslušná kruhová frekvencia bude

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (11)$$

Podobne poznáme z experimentu aj intenzity jednotlivých spektrálnych čiar. Na druhej strane nám experiment nič nehovorí o trajektórii elektrónu.

V tejto situácii Heisenberg navrhol radiálne riešenie problému. Podľa neho namiesto trajektórie $x(t)$ budeme sústavu – v tomto prípade lineárny harmonický oscilátor – charakterizovať tabuľkou – Tab. 1 čo môžeme schematicky zapísať ako

$$x(t) = \{x_{nm} e^{i\omega_{nm} t}\}, \quad n, m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (12)$$

Tab.1 Tabuľka priradená k súradnici x

	0	1	2	3	4
0	x_{00}	$x_{01}e^{i\omega_{01}t}$	$x_{02}e^{i\omega_{02}t}$	$x_{03}e^{i\omega_{03}t}$	$x_{04}e^{i\omega_{04}t}$
1	$x_{10}e^{i\omega_{10}t}$	x_{11}	$x_{12}e^{i\omega_{12}t}$	$x_{13}e^{i\omega_{13}t}$	$x_{14}e^{i\omega_{14}t}$
2	$x_{20}e^{i\omega_{20}t}$	$x_{21}e^{i\omega_{21}t}$	x_{22}	$x_{23}e^{i\omega_{23}t}$	$x_{24}e^{i\omega_{24}t}$
3	$x_{30}e^{i\omega_{30}t}$	$x_{31}e^{i\omega_{31}t}$	$x_{32}e^{i\omega_{32}t}$	x_{33}	$x_{34}e^{i\omega_{34}t}$
4	$x_{40}e^{i\omega_{40}t}$	$x_{41}e^{i\omega_{41}t}$	$x_{42}e^{i\omega_{42}t}$	$x_{43}e^{i\omega_{43}t}$	x_{44}

Pojem klasickej trajektórie sa týkal vždy len stavu, v ktorom sa sústava nachádzala vtedy, keď začínala vyžarovať. V klasickej fyzike sa zväčša predpokladalo, že žiarenie, ktoré klasická nabitá častica vyžaruje, ovplyvní jej stav len veľmi málo. V kvantovej mechanike je to ale podstatne iné. Pri vyžarovaní „preskakuje“ nabitá častica zo stavu n do stavu m a stav sústavy sa teda podstatne mení. V Heisenbergovej tabuľke pre súradnicu x máme vždy dva indexy, jeden – v našom prípade n označuje pôvodný stav častice a druhý, m označuje konečný stav sústavy. S každým prvkom v tabuľke je spojená aj príslušná kruhová frekvencia ω_{nm} . Spôsob, akým ω_{nm} vstupuje do určitého miesta tabuľky je naznačený výrazmi (4) a (7). Ale treba tu opäť zdôrazniť, že v (4) aj v (7) sa exponenty týkajú jednej klasickej trajektórie, vo výraze (12) je ω_{nm} dané rozdielom energií medzi začiatočným a konečným stavom.

Rovnako ako súradnici priradil Heisenberg tabuľku aj hybnosti

$$p(t) = \{p_{nm}e^{i\omega_{nm}t}\}, \quad n, m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (13)$$

Veličiny x_{nm} v Tab. 1 a vo výraze (12) sú tiež blízko k priamo pozorovateľným veličinám.

Heisenberg totiž predpokladal (a ako sa neskôr ukázalo, správne), že veličiny x_{nm} budú súvisieť s intenzitami vyžarovania podobne ako v klasickej fyzike (pozri vzťahy (2) a (10), teda, že bude platiť¹⁵⁵

$$I_{nm} \sim (\omega_{nm})^4 |x_{nm}|^2 \quad (14)$$

Heisenbergova schéma opisu lineárneho harmonického oscilátora vyzerala potom nasledovne. V klasickej fyzike je energia (Hamiltonián) tohto systému daná vzťahom

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (15)$$

a pohybové rovnice, známe už z gymnázia, sú

$$\dot{p} \equiv \frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x \quad (16a)$$

$$\dot{x} \equiv \frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} p \quad (16b)$$

Heisenberg zachoval rovnicu (15) aj rovnice (16) pritom ale nahradil hybnosť p a súradnicu x svojimi tabuľkami podľa rovníc (12) a (13). To sa ukázalo byť pomerne jednoduchým problémom – prideme k tomu o chvíľu. Rovnice (16) rýchlo vedú ku vzťahu známemu z klasickej fyziky

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\omega^2 x \quad (17)$$

Toto máme ale chápať ako vzťah medzi tabuľkami. Na pravej strane x nahradíme tabuľkou x_{nm} a tabuľku násobíme ω^2 tak, že týmto faktorom násobíme každý prvok tabuľky. Rovnako druhú deriváciu tabuľky definujeme tak, že je to tabuľka, ktorá vznikne druhou deriváciou každého člena v tabuľke pre x . Tabuľky na ľavej a pravej strane (17) sú si rovné vtedy, ak sa rovnajú príslušné členy oboch tabuliek. Ak teraz dosadíme (12) do (17) dostaneme

$$(\omega_{nm}^2 - \omega^2) = 0 \quad (18)$$

¹⁵⁵ Poznamenajme, že dnes skôr hovoríme o pravdepodobnosti vyžarovania fotónu a potom by sme pravú stranu v (14) mali predeliť energiou fotónu, teda faktorom $\hbar\omega_{nm}$, aby sme z energie žiarenia dostali veličinu týkajúcu sa jediného fotónu.

Tento jednoduchý výsledok ukázal Heisenbergovi, že je na dobrej stope. V tom čase bolo známe, že hodnoty energie lineárneho harmonického oscilátora spĺňajú podmienku

$$E_n = n\hbar\omega + E_0, \quad n = 1, 2, \dots \quad (19)$$

čo bol vzťah, ktorý použil už Planck v roku 1900 pri analýze žiarenia čierneho telesa. Z rovnice (17) vidno, že x_{nm} môže byť rôzne od nuly len vtedy, ak $\omega_{nm} = \pm\omega$, teda podľa (19) len vtedy, ak $m = n + 1$ alebo $m = n - 1$. Prechod $n + 1 \rightarrow n$ odpovedá vyžiareniu fotónu s kruhovou frekvenciou ω a energiou $\hbar\omega$, pričom oscilátor prechádza do stavu s nižšou energiou. Naopak, prechod $n - 1 \rightarrow n$ odpovedá pohltieniu fotónu s energiou $\hbar\omega$ a prechodu oscilátora do stavu s vyššou hodnotou energie.

Ak sa oscilátor nachádza pôvodne v stave s vysokým n , bude postupne prechádzať do stavov s nižšími energiami podľa schémy

$$n \rightarrow (n-1) \rightarrow (n-2) \rightarrow (n-3) \rightarrow (n-3) \dots$$

a pri každom prechode emituje fotón s kruhovou frekvenciou ω . To je vcelku konzistentné s klasickým opisom (oscilátor vysiela žiarenia s tou kruhovou frekvenciou, na ktorej sám kmitá) a tým aj s princípom korešpondencie.

Heisenberg chcel ale dosiahnuť viac. Chcel, aby jeho nová teória určila hodnoty koeficientov x_{mn} a aby viedla k hodnotám energie kvantových stavov. Na to ale potreboval doplniť svoju schému ďalšou podmienkou. Situácia bola trochu podobná tej, v ktorej sa nachádzal Bohr, keď konštruoval svoj model atómu vodíka. Bohr vtedy doplnil klasickú rovnicu, ktorá žiadala, aby sa pri pohybe elektrónu po kruhovej dráhe, dostredivá sila rovnala Coulombovej sile, dodatočnou podmienkou $L = n\hbar$. Podľa nej sa moment hybnosti elektrónu rovná celočíselnému násobku Planckovej konštanty \hbar . Až touto podmienkou vstúpilo \hbar do hry a viedlo k Bohrovým výsledkom pre energie stacionárnych stavov atómu vodíka.

Podľa rovníc (12) a (13) Heisenberg mal tabuľky pre $\{x_{mn}\}$ a $\{p_{mn}\}$ a celková energia sústavy bola podľa (15) tiež tabuľkou. Ale \hbar zatiaľ v schéme nebolo. Heisenberg potrebný vzťah uhádol z princípu korešpondencie a z prác Bohra, Kramersa a Heisenberga o intenzitách spektrálnych čiar. K podrobnostiam sa o chvíľu vrátíme. Dodatočná Heisenbergova podmienka bola

$$(px)_{nn} - (xp)_{nn} = -i\hbar \quad (20a)$$

Tento vzťah veľmi skoro zovšeobecnil Born a Jordan na súčasný tvar

$$(px)_{nm} - (xp)_{nm} = -i\hbar \delta_{nm} \quad (20b)$$

kde δ_{nm} je Kroneckerov symbol $\delta_{nm} = 1$ ak $n = m$, a $\delta_{nm} = 0$, ak n je rôzne od m .

Pomocou (20) Heisenberg vo svojej základnej práci ukázal, že H je diagonálnou tabuľkou

$$H_{nm} = E_n \delta_{nm}, \quad \text{kde } n, m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (21)$$

Pričom

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (22)$$

sú hodnoty energie stacionárnych stavov lineárneho harmonického oscilátora. Okrem toho získal vyjadrenie pre x_{mn} a tým mohol určiť pravdepodobnosti pre emisiu fotónu pri určitom prechode medzi stacionárnymi stavmi.

Po technickej stránke bol jeho postup dosť zložitý a preto si o ňom niečo povieme až v ods. P1.6.

Teraz sa ešte vrátíme k otázke definície súčinu dvoch tabuliek. Ak vynecháme časové faktory (položíme $t = 0$) riešenie je

$$(x^2)_{nm} = \sum_k x_{nk} x_{km} \quad (23)$$

Práve z časových faktorov vidíme, že toto je dobrá definícia. Časový priebeh na ľavej strane má tvar $\exp[i(E_n - E_m)t/\hbar]$. Pri x_{nk} na pravej strane máme faktor $\exp[i(E_n - E_k)t/\hbar]$ a pri x_{km} máme $\exp[i(E_k - E_m)t/\hbar]$. Súčin dvoch časových faktorov na pravej strane (23) dá presne faktor na ľavej strane a to pri ľubovoľnom k .

V skutočnosti Heisenberg „uhádol“ vzťah (23) z analógie s tým ako sa chovajú koeficienty súčinu dvoch funkcií a koeficientov samotných funkcií pri rozklade súčinu a samotných funkcií do Fourierovho radu. Termín „uhádol“ by sa niektorým čitateľom mohol zdať nevhodný a málo dôstojný.

Ale nie je to tak – zákony novej fyziky mikrosвета bolo treba „vytúšiť“ a „uhádnuť“. Existujúcu klasickú fyziku bolo pri tom možné použiť len ako pomôcku pre takéto „uhádnutie“ či „vytúšenie“.

Výraz (15) pre energiu sústavy obsahuje x^2 a p^2 . Pritom x aj p chápeme ako tabuľky a ich súčin je daný vzťahom (23).

PI.5 HISTORICKÉ POZNÁMKY

Pravidlo (23) pre násobenie Heisenbergových tabuliek je v skutočnosti pravidlom pre násobenie matic. Všimol si to Max Born, keď si spomenul na prednášky, ktoré počúval ešte ako študent vo Vratislavi. Nová kvantová mechanika navrhnutá Heisenbergom a rozpracovaná skoro na to Heisenbergom, Bornom a Jordanom dostala názov „maticová“ (kvantová) mechanika.

Jeden z pamätníkov obdobia vzniku maticovej mechaniky Fridrich Hund uvádza, že už okolo roku 1900 zapisovali experimentátori, ktorí sa zaoberali spektroskopiou, frekvencie daného spektra do štvorcovej schémy. Jej riadky a stĺpce boli číslované jednotlivými termami (dnes by sme povedali stacionárnymi stavmi). Od formálneho zápisu výsledkov k zdôvodneniu teoretického významu tabuliek prešlo vyše štvrt' storočia.¹⁵⁶ Fridrich Hund viedol spolu s W. Heisenbergom v 30. rokoch seminár z fyziky na Univerzite v Lipsku. Oznamy o seminároch mali jednoduchú hlavičku „Heisenberg mit Hund“, čo v nemčine znamená aj Heisenberg s Hundom aj Heisenberg so psom.

Čoskoro po vzniku maticovej kvantovej mechaniky vznikla aj Schrödingerova vlnová mechanika, s ktorou sme sa už zaoberali vyššie. Ukázalo sa však, že obe formulácie sú plne ekvivalentné. Vidno to napríklad z toho, že v Schrödingerovej formulácii je stacionárnemu stavu m s určitou hodnotou energie E_m priradená vlnová funkcia

Veličine x potom môžeme priradiť maticové elementy (prvky tabuľky)

$$x_{nm} = \int \psi_m^*(x, t) x \psi_n(x, t) dx = e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} x_{mn}(0) \quad (24)$$

kde

$$x_{mn}(0) = \int \phi_m^*(x) x \phi_n(x) dx$$

Podrobnejšie sa s otázkou ekvivalencie oboch formulácií nebudeme zaoberať.

Schrödinger pochopiteľne poznal Heisenbergovu prácu z roku 1925. K tomu, aby sa dal inou cestou ho viedlo úsilie zachrániť predstavy klasickej fyziky. Nepodarilo sa mu to a po celý život to ľutoval. Známý je jeho výrok: „Keby som bol vedel o tých prekliatych kvantových skokoch, nikdy by som sa nezaoberal atómovou fyzikou.“ O ekvivalencii oboch schém uverejnil prácu¹⁵⁷ „O vzťahu Heisenbergovej – Bornovej – Jordanovej kvantovej mechaniky a mojej“. Zaujímavá je poznámka, ktorú Schrödinger k tomuto článku pripojil: „Moju teóriu podnietili L. de Broglie (Ann. de Physique (10) 3, s. 22, 1925, Theses, Paris, 1924 a stručné, ale nekonečne jasnozrivé Einsteinove poznámky (Berl. Berichte 1925, s. 9). Neuvedomujem si dajaký genetický súvis s Heisenbergom. Pochopiteľne som vedel o jeho teórii, ale odtsrašili ma, ak nemám povedať, že odpudili, metódy transcendentnej algebry, ktoré sa mi zdali veľmi komplikované, a tiež nedostatok názornosti.“

Nedostatok názornosti novej kvantovej mechaniky bol problém, s ktorým sa Schrödinger do konca svojho života nezmieril. Druhá Schrödingerova námietka, zložitost' matematického aparátu, mala iba relatívny význam. Iný popredný fyzik, P. Dirac, reagoval úplne inak. Prvý raz sa oboznámil s maticovou

¹⁵⁶ Hund, F.: Das Korespondenzprinzip als Leitfader zur Quantenmechanik von 1925, in Nova Acta Leopoldina, Halle (Saale), Deutsche Akad. Der Naturforscher, Leopoldina, 1976, s. 7-20.

¹⁵⁷ Annalen der Physik, 79 (1926) s. 734

kvantovou mechanikou v lete 1925 v Cambridgei, keď o nej v Kapicovom klube referoval Werner Heisenberg. (Kapica organizoval v Cambridgei večerné semináre, ktorým sa hovorilo Kapicov klub.) Dirac si potom ešte prečítal Heisenbergov článok a napokon – ako často spomínal – pochopil, že v ňom je kľúč k teoretickému opisu mikrosveta. Naproti tomu Schrödingerove články na Diraca nezapôsobili – aj preto, že mu bol vzdialený matematický aparát, ktorý Schrödinger používal.

Max Born bol medzi prvými, kto pochopil, že David Hilbert sa už dávno zaoberal podobnosťou medzi určitými algebraickými formami a riešeniami diferenciálnych rovníc podobných tým, ktoré použil Schrödinger. Napokon J. von Neumann vypracoval elegantnú matematickú formuláciu kvantovej mechaniky, ktorá zahŕňa aj Schrödingerovu aj Heisenbergovu formuláciu.¹⁵⁸

P1.6 NIEKTORE TECHNICKÉ PODROBNOSTI K HEISENBEROVÝM KOMUTAČNÝM VZŤAHOV

Heisenbergove komutačné vzťahy sú kľúčom k podstate maticovej kvantovej mechaniky. Vzhľadom na to, že sú základom novej fyzikálnej teórie, nemohli byť odvodené zo starej teórie, ale museli byť „uhádnuté“. V tomto odstavci si ukážeme, ako Heisenberg, Born a Jordan tieto vzťahy najprv „uhádli“ a potom kvalitatívne zdôvodnili. Pri svojom postupe vychádzali zo „starej“ kvantovej mechaniky, teda z Bohrovho-Sommerfeldovho modelu a z princípu korešpondencie. Pozrime sa najprv na ten aspekt princípu korešpondencie, ktorý bol pri ich úvahách podstatný.

Pre určitosť si predstavme lineárny harmonický oscilátor s malou „dodatčnou“ potenciálnou energiou $\delta V(x)$ analyzovaný v rámci starej kvantovej teórie. Potenciálna energia teda bude

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \delta V(x) \quad (25)$$

dodatčný člen $\delta V(x)$ spôsobí dve veci. Po prvé, energie stacionárnych stavov nebudú presne rovné $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ ale budú trochu posunuté. Po druhé, a to je teraz podstatné, pohyb častice v n -tom stave nebude čisto harmonický (ako $\sin(\omega t)$), ale budú v ňom aj vyššie harmonické. Ak perioda pohybu v n -tom stacionárnom stave je T_n , potom trajektóriu častice budeme môcť písať ako reálnu časť z výrazu

$$x_n(t) = \sum_k x_n(k) e^{ik\omega_n t} \quad (26)$$

kde $\omega_n = 2\pi/T_n$ a k vo výraze (26) je celé číslo. Vzhľadom na to, že porucha $\delta V(x)$ je malá a vzhľadom na to, že perióda lineárneho harmonického oscilátora nezávisí od amplitúdy (maximálnej výchylky) sa bude ω_n len veľmi málo líšiť od ω , pričom ω je tá kruhová frekvencia, ktorá vystupuje vo výraze (25). Pre čistý harmonický pohyb by sme na pravej strane (26) mali len $k = 1, k = -1$, ale ak pohyb nie je striktné harmonický sčítujeme v (26) cez všetky k .

Ak je kmitajúca častica nabitá, bude vysielať žiarenie (pozri ods. P1.2), pričom kruhové frekvencie žiarenia budú rovné ω_n a intenzita vyžarovania tejto spektrálnej čiary bude úmerná $(k\omega_n)^4 |x_n(k)|^2$. Zdôraznime ešte raz, že doteraz sme hovorili o klasickej častici, pohybujúcej sa po určitej klasickej trajektórii (nie je dôležité, že je to trajektória vybraná Bohrovou-Sommerfeldovou podmienkou) a hovorili sme o klasickom žiarení, ktoré táto častica vysiela. Intenzita (a tým aj energia žiarenia) môžu byť ľubovoľne malé, takže z hľadiska klasickej fyziky je schéma konzistentná – častica sa pohybuje po určitej trajektórii a vyžaruje.

Z hľadiska kvantovej fyziky však schéma nie je konzistentná. Ak sa na žiarenie pozeráme z hľadiska kvantovej fyziky, dostávame iný obraz. Žiarenie s uhlovou frekvenciou $k\omega_n$, nie je klasickým žiarením, ale je to fotón, ktorý má energiu $\hbar k\omega_n$ približne rovnú $\hbar k\omega$ a nabitá častica, ktorá tento fotón vyžiarila nemôže ostať v pôvodnom stacionárnom stave, ale musí prejsť do stavu s nižšou energiou. V prípade lineárneho harmonického oscilátora musí platiť

$$E_n = \hbar k\omega_n + E_f$$

kde E_n je energia začiatočného stavu a E_f je energia konečného stavu častice. Pretože platí $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

¹⁵⁸ Hilbert D., Neumann J. von, Nordheim L.: Über die Grundlagen der Quantenmechanik, Math. Ann. 98 (1928) s. 1-30.

vidíme hneď, že $E_f = E_{n-k}$, takže

$$E_n = \hbar k \omega_n + E_{n-k} \quad (27)$$

Pritom stále využívame to, že ω_n a ω sa približne rovnajú a – okrem výnimočných situácií – ich môžeme zameniť.

Predchádzajúca úvaha ale ukazuje, že veličina $x_n(k)$, ktorá v starej kvantovej teórii označovala vyššiu harmonickú komponentu trajektórie n -tého stacionárneho stavu, musí byť v novej kvantovej teórii spojená s **prechodom** zo stavu n do stavu $n-k$. Tento prechod od významu veličín v starej a v novej kvantovej teórii môžeme teda schematicky označiť ako

$$x_n(k) \rightarrow x_{n,n-k} \quad (28)$$

Toto bola v podstate základná myšlienka „Heisenbergovej revolúcie“. Vo vzťahu (28) máme na ľavej strane veličinu klasickej fyziky, týkajúcu sa pohybu častice po klasickej trajektórii, na pravej strane máme „prvok tabuľky“, ktorý je už veličinou novej kvantovej fyziky. Pritom $x_{n,n-k}$ je veličina, ktorá sa týka dvoch stavov: začiatočného stavu n a konečného stavu $n-k$. Prirodzenosť vzťahu (28) bola zrejme tým, čo urobilo Heisenbergovu myšlienku príťažlivou pre fyzikov, ktorí poznali starú kvantovú teóriu a princíp korešpondencie a najmä pre tých, ktorí sa trápili s vysvetlením spektier atómov.

Zvyšok tohto odseku je pomerne technický. Ukážeme si v ňom ako Heisenberg a Born s Jordanom získali komutačné vzťahy pre „tabuľky“ $x_{n,m}$ a $p_{n,m}$. Postupovali tak, že využívali vzťahy starej kvantovej teórie a na správnych miestach urobili zámenny typu (28) a podobné zámenny pre hybnosť častice.

Podľa ich postupu zapíšeme najprv podmienku pre n -tý stacionárny stav častice lineárneho harmonického oscilátora s malou pridanou potenciálnou energiou $\delta V(x)$.

$$\oint p_n dx_n = 2\pi n \hbar + J_0 \quad (29)$$

Prepíšme to do tvaru

$$\int_0^{T_n} p_n(t) \frac{dx_n(t)}{dt} dt = 2\pi n \hbar + J_0 \quad (30)$$

Zavedme uhlovú frekvenciu $\omega_n = 2\pi/T_n$, pričom ω_n a len málo líši od ω . Rozviňme $x_n(t)$ a $p_n(t)$ do Fourierových radov

$$\begin{aligned} x_n(t) &= \sum_k x_n(k) e^{ik\omega_n t} \\ \frac{dx_n(t)}{dt} &= \pi i \omega_n \sum_k k x_n(k) e^{ik\omega_n t} \\ p_n(t) &= \sum_j p_n(j) e^{ij\omega_n t} \end{aligned} \quad (31)$$

Pritom sčítujeme cez k aj cez j od $-\infty$ do $+\infty$. Ak druhý a tretí výraz v (31) dosadíme do (30) dostaneme po jednoduchých úpravách

$$i \sum_k k x_n(k) p_n(-k) = n \hbar + \frac{J_0}{2\pi} \quad (32)$$

Výrazu J_0 na pravej strane sa zbavíme tak, že „derivujeme“ (32) podľa n . Prídeme tak k

$$i \sum_k k \frac{d}{dn} [x_n(k) p_n(-k)] = \hbar \quad (33)$$

Teraz urobíme tú podstatnú zámenu danú vzťahom (28)

$$x_n(k) \rightarrow x_{n,n-k} \quad p_n(-k) \rightarrow p_{n-k,n} \quad (34)$$

Záměny nie sú jednoznačné, očakávame ale, že $p_{n-k,n}$ a $p_{n,n+k}$ sú približne rovnaké, takže namiesto $p_n(-k) \rightarrow p_{n,n+k}$ sme napísali druhú z možností v (34). Po využití (34) prepíšeme (33) do tvaru

$$i \sum_k k \frac{d}{dn} [x_{n,n-k} p_{n-k,n}] = \hbar \quad (35)$$

Číslo n nadobúda len celé hodnoty a deriváciu funkcie $f(n)$ podľa n budeme chápať v zmysle

$$\frac{df(n)}{dn} = \frac{f(n+1) - f(n)}{(n+1) - n} = f(n+1) - f(n)$$

Podobným postupom dostaneme

$$k \frac{df(n)}{dn} = f(n+k) - f(n)$$

Poznávame, že tieto úpravy nie sú jednoznačné, ale bežne ich používali Heisenberg, Kramers a ďalší keď pracovali v Kodani začiatkom 20-tych rokov na analýze spektier (pred vznikom maticovej kvantovej mechaniky). Po týchto úpravách z (35) dostaneme

$$\sum_k \{x_{n+k,n} p_{n,n+k} - x_{n,n-k} p_{n-k,n}\} = -i\hbar \quad (36)$$

V prvom člene prehodíme poradie a rozpišeme výraz na dve sumy

$$\sum_k p_{n,n+k} x_{n+k,n} - \sum_k x_{n,n-k} p_{n-k,n} = -i\hbar \quad (37)$$

V prvom člene nahradíme sumačnú premennú k premennou $m = n + k$, v druhom zameníme m za $n - k$ a dostaneme

$$\sum_m (p_{nm} x_{mn} - x_{nm} p_{mn}) = -i\hbar \quad (38)$$

Vo výrazoch (32) a (33) súčty prebiehali od $k = -\infty$ do $k = +\infty$, ale tam sme hovorili o Fourierových koeficientoch v rozvoji klasickej trajektórie $x_n(t)$, $p_n(t)$. Po zámene (34) už hovoríme o „prvkoch tabuľky“ priradených dvojiciam kvantových stavov sústavy. Ak základnému stavu priradíme $m = 0$, prvému excitovanému $m = 1$, atď. potom súčet cez m v (38) už prebieha len od 0 po ∞ . Vzťah (38) možno potom prepísať ako

$$(\hat{p}\hat{x})_{mn} - (\hat{x}\hat{p})_{mn} = -i\hbar \quad (39)$$

kde \hat{p} je matica priradená hybnosti a \hat{x} je matica priradená súradnici x . Výraz (39) odvodil Heisenberg vo svojej prvej práci. Veľmi skoro na to ho Born a Jordan rozšírili aj na nediagonálne členy a zapísali ho v tvare

$$\hat{p}\hat{x} - (\hat{x}\hat{p}) = -i\hat{1} \quad (40)$$

kde $\hat{1}$ je jednotlivá matica. Tento vzťah sa nazýva Heisenbergovým komutačným vzťahom. Je jedným zo základných zákonov kvantovej mechaniky a ako ukázal Heisenberg¹⁵⁹ v r. 1927 vyplývajú z neho vzťahy neurčitosti. Pre operátory x , p možno (40) ľahko získať v Schrödingerovej formulácii kvantovej mechaniky.

¹⁵⁹ Heisenberg, W.: O názornom obsahu kvantovoteoretickej kinematiky a mechaniky, Zeit. f. Phys. 43 (1927) s. 172-198.

PRÍLOHA 2.

KVANTOVÁ MECHANIKA, WERNER HEISENBERG A SLOVENSKO

Juraj Šebesta

Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky,
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK
sebesta@fmph.uniba.sk

ÚVOD

V roku 2000 uplynulo 100 rokov od prednášky Maxa Plancka na zasadnutí Nemeckej fyzikálnej spoločnosti. Na vysvetlenie svojho zákona rozdelenia energie žiarenia absolútne čierneho telesa vtedy zaviedol predstavu, že energia lineárneho harmonického oscilátora sa môže meniť iba skokom, nie plynulo. Keďže išlo o prvý prípad kvantovania fyzikálnej veličiny, často sa táto prednáška pokladá za začiatok kvantovej éry, alebo dokonca za zrod kvantovej mechaniky, ako to svojho času povedal Arnold Sommerfeld. Prvá charakteristika do istej miery vystihuje situáciu, druhá je od základu mylná. Muselo totiž uplynúť celé štvrtstoročie, kým sa začali klásť naozajstné základy kvantovej mechaniky ako novej teórie. Palma prvenstva v tomto prípade jednoznačne patrí Wernerovi Heisenbergovi.

Preto by sme chceli podrobnejšie hovoriť o zrode kvantovej fyziky i o zásluhách Wernera Heisenberga na jej vzniku. A čo má s tým všetkým spoločné Slovensko? Veľa. To je dôvod, prečo sa zmienime aj o dvoch fyzikoch pôvodom zo Slovenska, ktorí mali nemalé zásluhy na vzniku resp. vývoji kvantovej mechaniky – o Philippovi Lenardovi a Jánovi Fischerovi. No a napokon budeme hovoriť aj o stretnutí samého Heisenberga so Slovenskom – o jeho návšteve v Bratislave v roku 1943. Začnime však pekne po poriadku.

P2.1 PHILIPP LENARD A KVANTOVÁ MECHANIKA

Hádám ani netreba zdôrazňovať, že kvantová mechanika nespadá z neba, ale že bola výsledkom dlhého vývoja. Zrodila sa z potreby vysvetliť javy, čo sa vymykali z rámca vtedajšej fyziky, ktorú dnes zvykneme nie celkom šťastne nazývať klasická. Nová fyzika zabúchala na dvere nového storočia hneď trikrát: v novembri 1895 Wilhelm Konrad Röntgen objavil nový druh žiarenia, zvané lúče X. Krátko nato – v marci 1896 Henri Becquerel objavil ďalšie neznáme žiarenie – dnes ho nazývame rádioaktívne. Uplynul iba rok a J. J. Thomson v máji 1897 oznámil novú šokujúcu zvesť: musí existovať častica menšia než atóm.

Tieto javy a ich príčiny uspokojivo vysvetlila až kvantová teória. Nie je zveličením tvrdenie, že na všetkých spomínaných objavoch má svoj podiel Philipp Lenard. Kto bol tento človek, ktorý na prelome 19. a 20. storočia patril medzi najvýznamnejších experimentálnych fyzikov?

Philipp Lenard sa narodil 7. júna 1862 v Bratislave na Kozej ulici. Jeho predkovia prišli do Bratislavy z Tirolska. Lenard starší bol spolumahajiteľom továrne na výrobu vína Lenard a Laban. Malý Philipp sa vzdelával najprv doma a neskôr vo farskej škole pri Dóme sv. Martina. V r. 1872 začal študovať na reálnom gymnáziu v Bratislave, ktoré vzniklo v roku 1850 ako prvá škola nového typu v Uhorsku. Na rozdiel od klasických gymnázií sa tu pozornosť sústreďovala na také predmety ako matematika, fyzika, chémia, zemepis. Učila sa tu aj deskriptívna geometria, kreslenie, rysovanie a pod. Fyziku Philippa učil Virgil Klatt – jemu vďačíme za to, že sa mladý Lenard stal fyzikom. Preto o ňom aspoň niekoľko slov.

Klatt získal vysokoškolské vzdelanie na univerzite vo Viedni. Experimentálnu fyziku mu prednášal Jozef Stefan, objaviteľ Stefanovho-Boltzmannovho zákona, matematiku a niektoré partie teoretickej fyziky Maximilián Petzval, autor matematickej teórie fotoobjektívu, teóriu tepla a mechaniku Josef Loschmidt – autor prvého odhadu veľkosti molekuly. V r. 1875 Virgil Klatt zložil skúšky učiteľskej spôsobilosti, pričom ho skúšali mediiným prof. Stefan a vtedy ešte mladý profesor Ludwig Boltzmann.

Počas svojej pedagogickej kariéry sa V. Klatt systematicky venoval vedeckej práci. Zameriaval sa hlavne na elektrické výboje v zriadených plynoch, katódové lúče a fosforescenciu. Vo fyzikálnom kabinete mal veľa vlastnoručne zhotovených prístrojov a pomocou nich demonštroval na hodinách fyziky rozmanité javy. Tieto okolnosti – pestré a zaujímavé hodiny fyziky a systematický výskum jeho fyzikára – pritiahli k fyzike aj mladého Philippa. Neskôr učiteľ a žiak spolu pracovali na výskume fosforescencie a uverejnili tri články. Na tomto základe vznikla celá škola. Z nich neskôr vychádzali napríklad aj americkí fyzici, ktorí vyvíjali obrazovky pre radary.

V Klattovom fyzikálnom kabinete sa Philipp medziiným zoznámil aj s katódovými lúčmi. Neskôr napísal, že výboje v zriadených plynoch sa v tých časoch skúmali tak intenzívne iba v laboratóriu Williama Crookesa v Londýne a v Klattovom školskom kabinete v Bratislave.

Takže Lenardova cesta k fyzike sa začala na bratislavskej reálke a na jej začiatku stál jeho fyzikár. Postupne sa Philipp Lenard vypracoval na popredného experimentátora. Najvýznamnejšie úspechy dosiahol v dvoch oblastiach: vo výskume katódových lúčov a v štúdiu fotoefektu, ktorý objavil jeho učiteľ v Bonne Heinrich Hertz.

Philipp Lenard a katódové lúče

Spravidla sa uvádzajú dva Lenardove príspevky v tejto oblasti. Predovšetkým rozvinul Hertzovu myšlienku a do experimentálnej fyziky zaviedol „Lenardovo okienko“ – v stene katódovej trubice umiestnil tenkú hliníkovú fóliu. Takto vyviedol katódové lúče z trubice do otvoreného priestoru. Tým získal lepšie podmienky na výskum katódového žiarenia. Vďaka tomu zistil, že

- prenikajú do vzduchu do vzdialenosti 10 cm, vo vákuu môžu bez oslabenia prejsť až niekoľko metrov, na plynoch sa rozptyľujú,
- nesú záporný náboj a pod účinkom elektrického a magnetického poľa sa vychyľujú.

Treba zdôrazniť, že Lenard si vytvoril aj vlastnú predstavu o povahe katódových lúčov. V tom čase panovali dva názory. Kontinentálni fyzici, osobitne nemeckí, boli presvedčení, že ide o žiarenie. Anglickí bádatelia, reprezentovaní hlavne Williamom Crookesom, obhajovali názor, že ide o prúd častíc vychádzajúcich z katódy a nesúcich záporný elektrický náboj. Na základe vlastných experimentov Lenard dospel k záveru, že ani jedna hypotéza nie je správna, pretože

- hmotnosť a veľkosť častíc tvoriacich katódové lúče musí byť menšia než hmotnosť a veľkosť molekúl i atómov,
- na druhej strane, rýchlosť častíc je podstatne nižšia než rýchlosť svetla.

Takto Philipp Lenard dospel k názoru, že katódové lúče nie sú ani elektromagnetickým žiarením, ani časticami v klasickom zmysle, ale niečím medzi tým – nazval ich kvantá elektriny. Bol presvedčený, že sú nehmotné, pretože nemajú hybnosť (ešte desať rokov bolo treba čakať na Einsteina). Nesú však elektrický náboj. Už v roku 1896 Lenard nameril rovnaký pomer ich náboja k hmotnosti ako o rok neskôr Thomson, keď objavil „elektrón“. Vidíme, že Lenard mal objav subatomárnej častice doslova „na tanieriku“.

Za výskum katódových lúčov získal Ph. Lenard v roku 1905 Nobelovu cenu za fyziku. Právom, pretože z výskumu katódových lúčov, na ktorom mal podstatný podiel, vyšli tri najvýznamnejšie objavy konca 19. storočia: objav röntgenového žiarenia, objav rádioaktivity a objav elektrónu. Jeho úspechy ocenila aj bratislavská univerzita udelením čestného doktorátu v roku 1942. Treba povedať, že dodnes je Lenard jediným nositeľom Nobelovej ceny pôvodom z územia dnešného Slovenska.

Na základe svojich experimentov s katódovými lúčmi Lenard navrhol zaujímavý model atómu. Keďže rýchle katódové lúče môžu preniknúť cez tisíce atómov, väčšia časť atómu musí byť prázdna. Okrem prázdna sú podľa Lenarda v atóme tzv. dynamidy – dvojice kladne a záporne nabitých elektrónov s určitým dipólovým momentom a budia elektrické pole schopné zadržať pomalé elektróny, nie však rýchle. Ph. Lenard tiež vyrátal, že v určitom malom objeme sú dynamidy usporiadané tak, že nimi nepreniknú nijaké katódové lúče. Objem tejto časti atómu predstavuje približne $1/10^9$ objemu celého atómu.

Niet pochýb, že Lenardov model atómu má veľa prvkov planetárneho modelu:

- atóm je zväčša prázdny,
- rozmer nepreniknuteľných dynamidov sa veľmi blíži rozmeru jadra atómu.

Jeden z Rutherfordových spolupracovníkov neskôr spomínal, že keď hľadali vysvetlenie pokusov Geigera a Marsdena s rozptylom alfa častíc na zlatých fóliách, Rutherford si spomenul na Lenardove

pokusy. Dá sa teda povedať, že Lenardov model bol v istom zmysle východiskom pre vybudovanie planetárneho modelu atómu. No a v snahe vysvetliť Rutherfordov model zasa Niels Bohr vypracoval prvú kvantovú teóriu vodíkového atómu.

Napriek tomu je tu aj podstatná odlišnosť: v Lenardovom atóme s atómovou hmotnosťou N je $k \cdot N$ dynamidov, zatiaľ čo v Rutherfordovom modeli existuje jediné jadro s nábojom, ktorý sa nerovná atómovej hmotnosti, ale atómovému číslu.

Ph. Lenard a fotoefekt

Výsledky svojich výskumov fotoefektu Lenard zhrnul v troch článkoch uverejnených v časopise *Annalen der Physik* v rokoch 1900, 1902, 1903. Dokázal, že častice vyletujúce z katódy po dopade ultrafialového žiarenia sú totožné s katódovými lúčmi. Okrem toho zistil, že rýchlosť týchto „lúčov“ sa rovná $1/30$ rýchlosti svetla vo vákuu, teda v nijakom prípade sa nemôžu pokladať za elektromagnetické vlny. Okrem toho objavil, že

- rýchlosť a energia týchto „kvánt elektriny“ nezávisí od intenzity dopadajúceho svetla, ale od frekvencie alebo vlnovej dĺžky svetla,
- počet „kvánt elektriny“ vyletujúcich z katódy za sekundu závisí od intenzity svetla.

Mimočodom, práve v poslednom zo spomínaných článkov Lenard opísal absorpciu katódových lúčov v rôznych plynch a formuloval svoj dynamidový model atómu – teda ešte pred Thomsonom a Nagaokom.

Keď v roku 1905 Albert Einstein postuloval kvantovú povahu svetla, jej opodstatnenosť demonštroval práve vysvetlením fotoefektu. Uvedený Einsteinov článok sa pokladá za začiatok kvantovej éry.

Od Plancka k Heisenbergovi

Ako sme spomínali, 14. decembra 1900 na zasadnutí Nemeckej fyzikálnej spoločnosti Max Planck prezentoval fyzikálne zdôvodnenie zákona rozdelenia absolútne čierneho telesa (čierneho žiariča). Od začiatku novej éry (1900) až po vznik novej teórie (1925) uplynulo 25 rokov. Čo sa za ten čas udialo?

P2.2 ŽIARENIE ABSOLÚTNE ČIERNEHO TELESA

Koncom roku 1900 Max Planck vyslovil **kvantovú hypotézu**:

Steny absolútne čierneho telesa si môžeme predstaviť ako sústavu harmonických oscilátorov; energia týchto oscilátorov nemôže nadobúdať ľubovoľnú hodnotu, ale sa musí meniť skokom, pričom platí

$$E_n = nh\nu$$

kde h je nová prírodná konštanta, n je prirodzené číslo.

V tomto článku M. Planck zaviedol označenie Boltzmannova konštanta. Treba zdôrazniť, že nič nepovedal o charaktere žiarenia.

V roku 1905 v článku *O jednom heuristickom aspekte týkajúcom sa vzniku a premeny svetla* Albert Einstein formuloval hypotézu o kvantovej povahe samého svetla. Z podmienky maxima entropie rovnovážneho stavu žiarenia a zo zákona zachovania energie odvodil Wienov zákon žiarenia, porovnal ho s Boltzmannovým výrazom pre entropiu ideálneho plynu a dospel k záveru:

Monochromatické žiarenie s malou hustotou (v rámci platnosti Wienovho zákona) sa v zmysle teórie tepla správa tak, ako by sa skladalo z navzájom nezávislých kvánt energie ($E = h\nu$).

V súvislosti s týmto článkom treba upozorniť na okolnosti, ktoré sa často vykladajú nepresne:

- nie je to článok o fotoefekte,
- kvantá energie sa nezaviedli na vysvetlenie fotoefektu, ale nová hypotéza sa aplikovala na jeho vysvetlenie, aby Einstein demonštroval „heuristický aspekt“ a nejako zdôvodnil užitočnosť svojej hypotézy,
- Einstein nepoužíval na označenie priestorovo ohraničených kvánt energie, z ktorých sa skladá svetlo, termín fotón; ten zaviedol americký fyzik a fyzikálny chemik Gilbert Lewis až v r. 1926.

V roku 1907 Albert Einstein aplikoval Planckovu kvantovú hypotézu na ďalšiu oblasť: na základe predstavy o kvantovaných energetických hladinách lineárneho harmonického oscilátora vypracoval

teóriu tepelných kapacít kryštalických tuhých látok pri nízkych teplotách. Jeho teóriu rozvinuli v roku 1912 Pieter Debye a v roku 1913 Max Born spolu s Theodorom von Kármán. Ukázalo sa pritom, že prestáva platiť ekvipartičný teorém – nevyhnutný dôsledok zákonov a predstáv klasickej fyziky.

V článkoch *Emisia a absorpcia žiarenia podľa kvantovej teórie* a *Ku kvantovej teórii žiarenia* z roku 1916 Albert Einstein skúmal dutinové žiarenie na základe detailného opisu rovnováhy medzi látkou a žiarením, pričom spolu s absorpciou zobral do úvahy aj spontánnu a indukovanú emisiu žiarenia vzbuđených atómov. Na základe tejto analýzy

- znovu odvodil Planckov zákon rozdelenia spektrálnej hustoty energie žiarenia a ukázal, že odvodenie je nemysliteľné bez stimulovanej (indukovanej) emisie,
- položil teoretické základy pre vývoj laserov,
- do kvantovomechanického opisu zaviedol nový prvok – pravdepodobnosť prechodu; je paradoxom, že neskôr rezolútne odmietal pravdepodobnostnú interpretáciu vlnovej funkcie a kvantovomechanických zákonov vôbec, hoci sám vypustil z fľaše džina pravdepodobnosti.

P2.3 ŠTRUKTÚRA ATÓMU

Objav subatomárnej častice (1897) a „objav“ elektrónu (1902), pokusy s katódovými lúčmi, Lorentzova teória Zeemanovho javu a výskum rádioaktívnych látok nasvedčovali, že atóm nie je najmenšou nedeliteľnou súčasťou akéhokoľvek prvku, ale že má určitú štruktúru: v každom atóme musia byť prinajmenšom elektróny. Tým sa potvrdil predpoklad D. I. Mendelejeva, že za periodický charakter vlastností prvkov zodpovedá ich vnútorná štruktúra.

Vyvstala otázka, ako si máme predstaviť vnútorné usporiadanie atómu, preto sa jeden po druhom objavilo niekoľko modelov atómu. Lenardov model (1903) sme už spomínali. Japonec Nagaoka (1904) sa inšpiroval analógiou s Maxwellovou teóriou Saturnových prstencov. Najväčší záujem vyvolal Thomsonov „pudingový model“ – v atóme je spojito rozložený kladný náboj a v ňom sú ako hrozienka v pudingu umiestnené záporne nabité elektróny, pričom celá sústava je v rovnováhe. Túto predstavu však vyvrátili experimenty Rutherfordovej skupiny (1908–09), na základe ktorých zasa vznikol Rutherfordov planetárny model atómu. Podľa klasických predstáv by však takýto atóm mal byť nestabilný, pretože pri kruhovom pohybe by elektrón musel strácať energiu vyžarovaním a v konečnom dôsledku by spadol na jadro. V skutočnosti však boli atómy stabilné. Tento rozpor musela fyzika odstrániť.

Po úspechoch, ktoré dosiahla kvantová hypotéza, fyzici začali uvažovať o kvantovoteoretických variantoch opisu atómu. Prvý pokus urobil brniansky rodák Arthur Haas – kvantoval (1910) starý Thomsonov model. Z rozmerovej analýzy určil pomocou Planckovej konštanty správnu veľkosť atómu.

Rutherfordov planetárny model kvantoval Niels Bohr (1913). Použil Planckovu hypotézu, Haasovu rozmerovú analýzu a Balmerov empirický vzorec pre spektrálne čiary atómu vodíka z roku 1885. V Bohrovom modeli sa elektróny v atóme v zásade pohybovali po eliptických dráhach povolených kvantovacou podmienkou a na týchto dráhach nevyžarovali. Konkrétne výpočty však Bohr robil pre jednoduchší prípad kruhových dráh. Pri preskoku elektrónu na susednú, energeticky nižšiu dráhu atóm vyžiaril jedno energetické kvantum podľa podmienky frekvencií

$$W_2 - W_1 = h\nu$$

Túto podmienku potvrdil pokus Jamesa Francka a Gustava Hertza z roku 1914, takže bez zmeny prešla aj do formalizmu kvantovej mechaniky. V r. 1915 Bohrov model zovšeobecnil Arnold Sommerfeld a nezávisle od neho i William Wilson. Obaja uvažovali pohyb elektrónu po eliptickej dráhe. V r. 1918 Niels Bohr formuloval princíp korešpondencie, ktorý pôvodne ukazoval vzťah medzi veličinami vystupujúcimi v jeho modeli a klasickými veličinami charakterizujúcimi pohyb elektrónu po kruhovej dráhe. Neskôr však slúžil ako výborné vodidlo pri budovaní kvantovej mechaniky. Bohrova-Sommerfeldova teória totiž zlyhala pri opise zložitejších atómov a pri pokuse určiť intenzitu spektrálnych čiar a polarizáciu vyžiareného svetla.

P2.4 NA PRAHU KVANTOVEJ MECHANIKY

Ďalšie obdobie prechodu od kvantovej hypotézy ku kvantovej mechanike (začiatok 20. rokov) prinieslo úspechy v rozvoji teórie i experimentu.

V r. 1922 Arthur Compton objavil efekt pomenovaný po ňom. Výsledky svojich experimentov vysvetlil pomocou predstavy o svetle ako súbore energetických kvánt i zákonov zachovania ich energie a hybnosti. Kľúčový význam mal pokus Otta Sterna a Waltera Gerlacha (1921), lebo poskytol dôkazy o reálnej existencii priestorového kvantovania, teda o diskrétnych hodnotách orientácie atómu v priestore. Nemeckí experimentátori dospeli k výsledkom, ktoré správne interpretovali v r. 1925 Georg Uhlenbeck a Samuel Goudsmith – zaviedli spin elektrónu ako ďalšiu charakteristiku jeho pohybového stavu.

Problém spinu sa objavil už koncom druhého decénia 20. storočia v súvislosti s určením stavu elektrónov v atóme. Ukázalo sa, že vedľa troch kvantových čísel – hlavného, orbitálneho (alebo tiež vedľajšieho) a magnetického (zaviedli ich Arnold Sommerfeld a Pieter Debye), treba charakterizovať stav elektrónu v atóme ešte štvrtým kvantovým číslom, aby sa dala zdôvodniť Mendelejevova tabuľka. Tento problém definitívne vyriešil Wolfgang Pauli: v r. 1924 formuloval *vylučovací princíp*.

Ďalšou oblasťou problémov, ktorých riešenie znamenalo dôležitý krok na ceste ku kvantovej mechanike, bola disperzia, rozptyl a polarizácia svetla. V prácach Rudolfa Ladenburga, Hendrika Kramersa a Wernera Heisenberga vznikol *pojmový model atómu* ako súboru virtuálnych oscilátorov. Ten sa stal spojovacím článkom medzi Bohrovým názorným modelom atómu a matematickým formalizmom kvantovej mechaniky.

P2.5 VZNIK KVANTOVEJ MECHANIKY A WERNER HEISENBERG

Kvantová mechanika vznikla zo snahy o riešenie niekoľkých odlišných problémov

- žiarenia absolútne čierneho telesa (Planck, Einstein),
- čiarového charakteru spektier (Balmer, Bohr),
- stability atómu (Bohr, Sommerfeld),
- povahy svetla (Einstein, Compton),
- interakcie žiarenia s látkou (Einstein, Ladenburg, Kramers).

Metódy, ktoré fyzici pritom použili, pochádzali z rôznych oblastí „klasickej“ fyziky: z teórie elektromagnetického poľa, termodynamiky a štatistickej fyziky. Túto „pôžičku“ kvantová mechanika vrátila aj s úrokmi. Vysvetlila všetky spomínané problémy a podmienila vznik celých odvetví fyziky: kvantovej elektrodynamiky, kvantovej štatistiky, kvantovej chémie a predovšetkým fyziky tuhých látok a kvantovej optiky, ktoré asi najviac ovplyvnili vývoj ľudskej spoločnosti.

Trvalo štvrt' storočia, než fyzika postúpila od kvantovej hypotézy ku kvantovej teórii. Riešenie mnohých problémov našiel v podobe novej mechaniky Werner Heisenberg (*15. 12. 1901 Würzburg – †1. 2. 1976 Mníchov). Patril medzi niekoľko málo svetových fyzikov, ktorým osud dožičil, aby vybudovali niektorú z hlavných fyzikálnych teórií. Tá Heisenbergova dala odpovede na mnohé otázky – aká je štruktúra hmoty, ako je svet usporiadaný, ako a prečo držia veci pokope atď. Na druhej strane však nastolila zásadne nové problémy – a nielen fyzikálne, ale hlavne filozofické, metodologické či epistemologické. Tak ako každá nová veľká teória ovplyvnila aj život ľudskej spoločnosti: pozitívne i negatívne. Veď jadrová energia môže byť človeku nielen dobrým sluhom, ale aj veľmi zlým pánom.

Čo sa týka vedeckej kariéry, Werner Heisenberg sa narodil do správnej doby. Rok a deň pred jeho narodením Max Planck predniesol referát, v ktorom sa po prvý raz objavila myšlienka kvantovania fyzikálnych veličín, kvantového pohľadu na prírodu a deje v nej. Tieto myšlienky a tento pohľad potom usporiadal do logického celku práve mladý Heisenberg. Doba bola preňho priaznivá aj tým, že než dospel, jeho predchodcovia starostlivo pripravili pôdu, z ktorej neskôr vyrástla kvantová mechanika. Mnohí boli presvedčení, že sa musí objaviť, už rok pred jej zrodom pre ňu vymysleli meno, nevedelo sa len, ako bude vyzerat' a kto túto takpovediac spiacu princeznú zobudí. Rozprávkovým princom sa napokon stal 24-ročný Werner Heisenberg.

Menej priaznivý bol osud k človeku Heisenbergovi. Ani nestihol poriadne vyrásť z chlapčenských nohavíc, keď vypukla vojna, neskôr nazvaná prvá svetová. Než dokončil gymnázium, v Nemecku začal vyčínať chaos a svojvôľa – spomeňme len nepokojný rok 1919 v Mníchove, kde žil. Po krátkom

období relativného pokoja v období Weimarskej republiky prišlo dvanásťročné obdobie temna, hrôzy a napokon ďalšej vojny – neporovnateľne hroznejšej, než bola prvá.

Pre Wernera Heisenberga bolo toto obdobie ešte krutejšie, lebo na jednej strane patril medzi tých, čo vyrastali v prostredí nekritických obdivovateľov expanzívneho cisárskeho Nemecka, ale na druhej strane po roku 1933 sotva mohol súhlasiť s tým, čo svojmu aj iným národom pripravili jeho krajanovia. Výčiny nacistov pocítil aj na vlastnej koži, keď ho označili za bieleho žida. Hoci ani vo svojej vlasti nebol prorokom, po vojne zaplatil daň za to, že jej zostal verný a neemigroval. Navyše sa táto nepriaznivá doba postavila medzi neho a ľudí, od ktorých sa učil, ktorí ho pripravili, aby splnil svoje neľahké poslanie zobudiť „spiacu princeznú“ a neskôr mu pomáhali nájsť pre ňu ten najpriliehavší odev.

Werner Heisenberg patril medzi tých velikánov fyziky, ktorí dosiahli najväčšie úspechy vo veľmi mladom veku. V týchto heroických časoch však nebol jediný, preto sa nová fyzika často nazývala „chlapčenská“ – mnohí z tých, čo sa pričínili o jej konečnú podobu, prípadne o jej aplikácie a ďalší rozvoj, mali okolo 25 rokov (okrem Heisenberga aj Wolfgang Pauli a Paul A. M. Dirac). Nečudo, veď myšlienky, z ktorých kvantová mechanika vychádzala, a dôsledky, ktoré prinášala, sa natoľko vymykali niekdajším predstavám, že ich pochopenie, a tým skôr rozvíjanie, si vyžadovalo um nespútané tradíciami.

Aj v prípade kvantovej mechaniky a samého W. Heisenberga platí známe „keď králi stavajú, poddaní majú plné ruky práce.“ Tentoraz to neboli iba poddaní teoretici, ale na svoje si prišli aj matematici – keď sa „pilovala“ matematická stránka novej teórie, filozofi – keď sa hľadala interpretácia jej výsledkov, experimentátori – keď sa overovali teoretické predpovede, a napokon i technici a vývojoví pracovníci – keď sa výsledky kvantovej fyziky uvádzali do praktického života. Dnes si neuvedomujeme, za čo z toho, čo nám uľahčuje a spríjemňuje život, vďačíme kvantovej fyzike – tej spiacej princeznej, ktorú zobudil práve mladý Werner Heisenberg.

Stalo sa to v júni 1925 na skalnatom ostrove Helgoland, kde si liečil sennú nádchu. Tu dokončil svoju prácu o kvantovej mechanike. Po návrate z Helgolandu sa ešte zastavil v Hamburgu a svoje výpočty prediskutoval s Wolfgangom Paulim. V práci pokračoval v Göttingene a problémy opäť písomne konzultoval so svojim najlepším priateľom Paulim. Potom článok odovzdal Maxovi Bornovi. Ten ho prečítal, podpísal odporučil a poslal do časopisu *Zeitschrift für Physik*. Článok vyšiel 18. 9. 1925 v 12. čísle tohto časopisu.

Heisenbergov prístup spočíval na štyroch oporných stĺpoch

- Bohrovej podmienke frekvencií,
- Kramersovom nenázornom modeli atómu ako súboru virtuálnych oscilátorov,
- Bohrovom princípe korešpondencie,
- princípe pozorovateľnosti Ernsta Macha.

V tých časoch už bolo jasné, že pri opise vlastností mikrosвета sa nedá vychádzať z tradičnej predstavy pohybu po trajektórii. Preto sa Heisenberg snažil namiesto toho zaviesť veličiny súvisiace s pozorovateľnými veličinami. Priamo pozorovateľné boli vtedy iba frekvencie spektrálnych čiar a príslušné intenzity. Za východisko si zvolil uhlové frekvencie ω_{mn} a amplitúdy A_{mn} žiarenia pohlteného alebo vyžiareného atómom pri prechode zo stavu s energiou E_m do stavu s energiou E_n . Pomocou nich vytvoril dvojzložkové výrazy s premennými m a n

$$A_{mn} \cdot e^{i\omega(m, n)t}$$

Fourierov rad z takých členov označil ako $x(t)$. Odvodil aj výraz pre

$$(x(t))^2 = x(t) \cdot x(t)$$

Keď však hľadal súčin $x(t) \cdot y(t)$, zistil, že nekomutuje. Keďže sa zaujímal o kvantovanie energie anharmonického oscilátora, komplikácie s nekomutatívnosťou násobenia nových veličín sa neprejavili. V klasickej rovnici pre anharmonický oscilátor nahradil veličinu $x(t)$ a jej derivácie novými veličinami a určil energetické hladiny anharmonického oscilátora. Zistil, že v jeho kvantovomechanickej reinterpretácii sa energia oscilátora zachováva.

Max Born si zakrátko uvedomil, že dvojzložkové veličiny sú vlastne matice. V spolupráci s Pascualom Jordanom prepísali Heisenbergove vzťahy a rovnice do maticového počtu. Heisenberg sa o novinke dozvedel v Kodani, kde dokončoval stáž u Nielsa Bohra. Ihneď pochopil, že maticový počet odstraňuje problém, ktorý považoval za prekážku ďalšieho postupu – nekomutatívnosť násobenia. Maticový počet

mu navyše umožnil, aby v kvantovej mechanike použil Bornovu poruchovú metódu a naznačil riešenie problémov s niekoľkými stupňami voľnosti. Definitívna podoba maticovej mechaniky sa objavila (1925) v spoločnej práci Maxa Borna, Wernera Heisenberga a Pascuala Jordana *Ku kvantovej mechanike II*. V histórii fyziky je známa ako *Práca troch mužov* (Dreimännerarbeit).

P2.6 VLNOVÁ MECHANIKA

Úplne iný prístup k riešeniu toho istého problému si v rokoch 1923–24 zvolil Louis de Broglie, ktorý nadviazal na Einsteinovu teóriu svetelných kvánt. Vlnové vlastnosti prisúdil nielen svetlu, ale aj časticiam s nenulovou pokojovou hmotnosťou. De Broglieho prácu privítal napríklad Albert Einstein, čo Erwina Schrödingera povzbudilo, aby vypracoval vlastnú verziu riešenia kvantových problémov – vlnovú mechaniku, založenú na riešení klasických diferenciálnych rovníc. V r. 1926 uverejnil na túto tému štyri články. Piata stať obsahovala dôkaz ekvivalentnosti jeho a Heisenbergovej kvantovej mechaniky.

V tom istom roku 1926 M. Born vypracoval pravdepodobnostnú interpretáciu vlnovej funkcie (alebo tiež stavového vektora či stavovej funkcie). V r. 1927 potom W. Heisenberg formuloval princíp neurčitosti a vzťahy neurčitosti pre kánonicky združené kvantovomechanické veličiny a N. Bohr vyslovil princíp komplementarity. Tým sa do určitej miery zdôvodnilo fungovanie matematického aparátu kvantovej mechaniky a vyjasnil sa jeho fyzikálny obsah. Paul A. M. Dirac v tej istej dobe vypracoval teóriu operátorov a ich reprezentácií, čím sa zavŕšila výstavba nerelativistickej kvantovej mechaniky.

P2.7 PRÍSPEVOK JÁNA FISCHERA

Krátko po prvých článkoch o novej mechanike, v rokoch 1926–28, Gregor Wentzel, profesor teoretickej fyziky na univerzite v Zürichu, uverejnil päť článkov o teórii pružných a nepružných zrážok, pričom v nej použil niektoré myšlienky Schrödingrovej vlnovej mechaniky a Bornovej kvantovej mechaniky zrážok. Zdôraznil v nich, že iba nová kvantová mechanika umožňuje vyriešiť problém fotoefektu, zrážok elektrónov a rozptylu Röntgenovho žiarenia na časticiach.

Práve na tieto problémy sústredil svoju pozornosť mladý slovenský teoretik Ján Fischer pôvodom z Turčianskeho Svätého Martina. Po štúdiách na Karlovej univerzite v Prahe strávil tri roky (1928–31) na univerzite v Zürichu, kde absolvoval doktorantúru pod vedením Gregora Wentzela.

Tu napísal dva články, ktoré v roku 1931 uverejnil v časopise *Annalen der Physik*. Prvý mal názov *Príspevky k teórii absorpcie rentgenových lúčov* a druhý – *O retardovaných maticových elementoch v teórii rozptylu a absorpcie lúčov*.

V prvom článku Ján Fischer analyzoval dva problémy

- rozdelenie fotoelektrónov podľa smeru,
- pravdepodobnosť excitácie závisiacej od koeficientu absorpcie.

Na ich vyriešenie vypracoval úplný matematický opis absorpcie lúčov X.

V druhom článku Fischer rozvinul svoju metódu výpočtu maticových integrálov a vyčíslil maticové integrály pre Comptonov jav na vodíkovom atóme v začiatočnom stave. Potom odvodil všeobecný vzorec pre vlnovú funkciu opisujúcu fotoefekt. Takto ako prvý bezo zvyšku vyriešil Comptonov jav a fotoefekt.

Mimochodom, články Jána Fischera boli odmenené cenou univerzity v Zürichu. Význam Fischerových výsledkov podčiarkuje skutočnosť, že oba články citoval Arnold Sommerfeld v piatom (1939) a vo všetkých nasledujúcich vydaniach svojej knihy *Štruktúra atómov a spektrálne čiary*. Odvolával sa na ne aj Hans Bethe v *Príručke fyziky* (Handbuch der Physik), ktorá vyšla v roku 1933.

P2.7 HEISENBERG V BRATISLAVE

V tejto časti opíšeme bezprostredné stretnutie zakladateľa kvantovej mechaniky so Slovenskom.

Werner Heisenberg navštívil Bratislavu v marci 1943 na pozvanie prof. Dionýza Ilkoviča, prednostu Ústavu technickej fyziky SVŠT a súčasne dekana Prírodovedeckej fakulty Slovenskej univerzity. Do

Bratislavu pricestoval 28. marca. Na železničnej stanici vzácneho hosťa privítali rektor Slovenskej vysokej školy technickej prof. F. Valentín, prof. D. Ilkovič a zástupkyňa Nemeckej akademickej výmennej služby (DAA). V slovenskej fyzikálnej komunite koluje historka o tom, ako vítajúci mali spoznať W. Heisenberga. Na otázku Dionýza Ilkoviča, ako ho spoznajú na stanici, údajne Heisenberg odpovedal, že bude mať v klope kabáta zastoknutú zlatú Planckovu konštantu h . Po oficiálnom prijatí u rektora SVŠT sa W. Heisenberg v sprievode prof. Františka Valentína a prof. Dionýza Ilkoviča zúčastnil na opernom predstavení v bratislavskom divadle, kde práve hosťoval v predstavení Barbiera zo Sevilly sólista viedenskej opery.

V pondelok 29. marca W. Heisenberg navštívil nemeckého vyslanca na Slovensku Ludina. Popoludní o 17.00 hod. sa vo veľkej posluchárni teoretických ústavov Lekárskej fakulty Slovenskej univerzity na Sasinkovej ul. uskutočnila prednáška s názvom *Dnešný stav atómovej fyziky*. Prednášateľa predstavil rektor SVŠT prof. Valentín. Na prednáške sa zúčastnil aj zástupca slovenskej vlády minister financií Dr. M. Pružinský, členovia profesorského zboru univerzity a veľa poslucháčov – odborníkov i laikov. Prednáška bola určená širšiemu publiku. Ako sme sa dozvedeli z dobovej tlače, prof. Heisenberg v nej načrtol vývoj atómovej fyziky od čisto špekulatívnych úvah starých Grékov. Potom sa zmienil o začiatkoch chémie a postupne poukázal na jednotlivé okolnosti, ktoré viedli k zavedeniu pojmu elektrón, protón a neutrón, ktoré sú základnými stavebnými kameňmi hmoty a elektriny. Podrobne sa zaoberal aj vývojom názorov na stavbu jadra atómov a spomenul pokusy, ktoré od roku 1932 vykonali fyzici z rôznych krajín a ktoré vďaka novým pohľadom je fyzika schopná vyložiť aspoň kvalitatívne. Osobitne podčiarkol umelú rádioaktivitu, ktorá sa už využíva v praxi. Na záver naznačil aj problémy, ktoré bude treba vyriešiť v budúcnosti. Podľa viacerých bratislavských novín – slovenských i nemeckých – bola prednáška veľmi názorná a početné obecenstvo ju odmenilo dlhotrvajúcim potleskom.

V utorok 30. marca predpoludním bol W. Heisenberg hosťom vládneho komisára (primátora) Dr. Kováča. Súčasťou návštevy bola aj prehliadka starej bratislavskej radnice. Na obed bol Werner Heisenberg zasa hosťom nemeckého vyslanca Ludina. Sprewádzal ho vedúci nemeckej akademickej výmennej služby a profesori F. Valentín a D. Ilkovič. V ten istý deň sa v posluchárni Ústavu fyziky SVŠT na Vazovovej ul. uskutočnila druhá prednáška a mala názov *O kozmickom žiarení*. Odznela v rámci tzv. Fyzikálno-chemických rozhovorov, ktoré prof. Valentín a prof. Ilkovič pravidelne konali tak pre bratislavských odborníkov, ako aj pre poslucháčov fyziky a chémie na PF SU. O tejto prednáške nemáme podrobnejšie informácie, z rôznych prameňov len vieme, že bola určená pre užší okruh odborníkov. Pri tejto príležitosti W. Heisenberg navštívil aj Ústav technickej fyziky SVŠT.

Večer sa v reštaurácii Savoy hotela Carlton uskutočnilo neoficiálne stretnutie so zakladateľom kvantovej mechaniky. Zúčastnili sa na ňom aj niektorí študenti vyšších ročníkov SVŠT a PF SU, ktorí v tom čase plnili funkciu asistentov prof. Ilkoviča. Podľa spomienok priamych účastníkov mal W. Heisenberg dobrú náladu, hral na klavíri a bol veľmi priateľský. K spomínanej večeri sa viaže zábavná historka. Podľa nej bolo stretnutie s nositeľom Nobelovej ceny za fyziku hlbokým zážitkom pre mladých slovenských fyzikov. Po odchode prof. Heisenberga jeden po druhom odpili malý dúšok vína z jeho pohára v nádeji, že sa na nich preniesie aspoň čo-to z jeho geniality.

V stredu 31. marca 1943 predpoludním sa Werner Heisenberg stretol „s niekoľkými známymi z nemeckej kolónie v Bratislave“ (ako napísal v oficiálnej správe o návšteve). Popoludní sa nakrátko zišiel s poslucháčmi bratislavskej univerzity a večer odcestoval do Berlína.

Hoci jej príprava sa nezaobišla bez administratívnych priesťahov a finančných problémov, návšteva Wernera Heisenberga v Bratislave sa predsa len uskutočnila. Pre obe strany bola veľkým prínosom. Prof. Heisenberg v cestovnej správe doslova napísal:

„Bratislavskí kolegovia ma prijali po každej stránke priateľsky. Aj pri osobných návštevách som nadobudol dojem, že vzťahy medzi nami, Nemcami, a kolegami z bratislavských vysokých škôl sú v každom ohľade v poriadku.“

W. Heisenbergovi sa dostalo na všetkých miestach veľmi dobrého prijatia. Aj jeho prednáška bola prijatá s veľkým záujmom. Zo spomienok účastníkov zasa vieme, že stretnutia s prof. Heisenbergom v hoteli Carlton boli mimoriadne priateľské.

Americký historik M. Walker vo svojej štúdii hodnotí Heisenbergove cesty do rôznych európskych krajín, ktoré podľa neho podnikol ako vyslanec Tretej ríše, ako propagandistické, prípadne prinajmenšom s istým propagandistickým nábojom. Súdiac podľa dokumentov i spomienok účastníkov,

v bratislavskej ceste W. Heisenberga prevládala viac osvetová stránka a kolegiálny prístup k slovenským fyzikom.

ZÁVER

Videli sme, že Planckova prednáška neznamenalala zrod kvantovej mechaniky, o ten sa postaral až o štvrt' storočie neskôr Werner Heisenberg, človek, ku ktorému bol osud žičlivý i nežičlivý – ostatne také bolo celé 20. storočie, ktorého symbolom sa stala práve kvantová mechanika a jej aplikácie. Môže nás len tešiť, že aj na Slovensku sa narodili ľudia, ktorí prispeli svojou troškou do mlyna. Pre pedagógov môže byť veľkým príkladom Virgil Klatt, ktorý vychoval zatiaľ jediného nositeľa Nobelovej ceny pôvodom zo Slovenska. Bodaj by sa čo najskôr objavil jeho nástupca!

LITERATÚRA

Čitateľom, ktorí by sa chceli podrobnejšie zoznámiť s kvantovou fyzikou odporúčame

FEYNMAN, R. P. – LEIGHTON, R. B. – SANDS, M.: *Feynmanove prednášky z fyziky*, Bratislava : ALFA, 1982.

Diel 2., kapitoly 37. a 38.

OREAR, J.: *Základy fyziky*. Bratislava : ALFA, 1976.

BEISER, A.: *Úvod do moderní fyziky*. Praha : Academia, 1975.

Náročný matematický aparát nie je potrebný pri úvodných kapitolách učebnice

PIŠÚT, J. – GOMOLČÁK, L. – ČERNÝ, V.: *Úvod do kvantovej mechaniky*. Bratislava : ALFA, 1983.

a zbierky úloh

PIŠÚT, J. – ČERNÝ, V. – PREŠNAJDER, P.: *Zbierka úloh z kvantovej mechaniky*, Bratislava : ALFA, 1985.

Obe učebnice sú prístupné aj v elektronickej verzii na adrese http://www.fmph.uniba.sk/index.php?id=el_st_m

Podrobnú diskusiu o niektorých základných experimentoch možno nájsť v knihe

HAJKO, V. a kolektív: *Fyzika v príkladoch*. Bratislava : Veda, 1988

S históriou vzniku kvantovej fyziky sa môžete zoznámiť v knihe

ZAJAC, R. – ŠEBESTA, J.: *Historické pramene modernej fyziky*, Bratislava : ALFA.

REGISTER

A			
analýza, rozmerová	69, 167	frekvencia, uhlová	26, 61, 78
ARAGO D.	92	FRESNEL A.	56, 92
atóm vodíka	9, 32, 100, 107, 129, 143, 159	funkcia komplexná, vlnová	143
AVOGADRO A.	17, 42, 54		
B		G	
balík, vlnový	83	GALILEI G.	9, 10, 14, 51
BALMER J.	35, 51, 57	GASSENDI P.	15
BERNOULLI D.	10, 16	GAY-LUSSAC J.	54
BERZELIUS J.	54	GEIGER H.	21, 65
BOHR N.	65, 165	GERMER L.	88, 95
Bohrov model atómu	11, 32, 159	GIBBS J. W.	94
BOLTZMANN L.	10, 59	GOUDSMIT S.	117, 125
BORN M.	123, 163, 165	GRIMALDI F.	49, 91
BOYLE R.	10, 14, 59	GUERICKE O.	15
BRAGG W. L.	10, 95		
BROGLIE L. de	86, 94	H	
BUNSEN R.	50, 52, 57	HAMILTON W.	88, 95
C		HANSEN H.	52
CLAUSIUS R.	58	HEISENBERG W.	12, 67, 76, 109, 165, 179, 180, 181
COMPTON A.	28, 68	HEITLER W.	127, 132, 140
Č		HERTZ G.	67
číslo, kvantové	114 – 120, 124	HERTZ H.	26, 59, 93
D		hmotnosť, atómu vodíka	19, 22, 42
DALTON J.	53	—, elektrónu	19, 42, 73
DAVISSON C.	88, 95	HOOKE R.	15, 49, 91
DEBYE P.	28, 63, 68	HUND F.	171
degenerácia	81, 114, 132	HUYGENS Ch.	15, 91, 141
DEMOKRITOS	9, 13	hybridizácia	134
dĺžka vlny	77, 89	hypotéza, de Broglieho	12, 37, 85, 100
E		I	
EINSTEIN A.	10, 62, 165	ILKOVIČ D.	181
EMPEDOKLES	90	interferencia	24, 63, 76, 89, 141
EPIKUIROS	9, 13	interpretácia vlnovej funkcie	129, 141
ESTERMANN I.	90, 95	J	
EULER L.	49, 56, 92	jama, potenciálová	151
experiment Davissona-Germera	88, 146	jav, Comptonov	24, 28, 68, 85
— Francka-Hertza	12, 27, 39	—, fotoelektrický	11, 24, 26, 48, 62, 85, 97
— Sterna-Gerlacha	95, 117, 164	—, tunelový	154
F		K	
FARADAY M.	19, 55	KAPICA P. L.	55, 65
FISCHER J.	27, 49, 175, 181	KEPLER J.	14, 98
FIZEAU A.	93, 94	KIRCHHOFF G. R.	50–53, 56
FOUCAULT J.	92–3	KLATT V.	175, 183
FRANCK J.	67	konfigurácia atómov, elektrónová	120, 132
FRANKLIN B.	17, 51, 53	konštanta, Avogadrova	9, 17, 42, 64
FRAUNHOFER J.	50, 56	—, Boltzmannova	61
		—, Planckova	11, 27, 36, 43, 48, 73
		KRÖNIG A. K.	10, 58
		KURLBAUM F.	25, 60
		kvantovanie energie	11, 26, 39, 97, 151

L			
LAPLACE P. S.	16, 58, 92		
LAUE M.	10, 65, 111, 164		
LEBEDEV P. N.	29, 59		
LENARD P.	26, 64, 175, 176		
LEONARDO DA VINCI	91		
LEUKIPPOS	9, 91		
LOMONOSOV M. V.	10, 16, 92		
LONDON F.	127, 132, 140		
LORENTZ H. A.	56, 66, 126		
LUCRETIVS	9, 14		
LUMMER O.	25, 60		
LYMAN T.	35, 52		
M			
MACH E.	165		
MARCI J. M.	49		
MARIOTTE E.	15		
MARSDEN E.	21, 65, 97		
MAXWELL J. C.	10, 58		
mechanizmus kvantovania energie	76, 151		
MENDELEJEV D. I.	55, 178		
mezoatóm	120		
MICHELSON A.	94		
mikroskop, Heisenbergov	157, 158		
molekula čpavku	127–8, 132–135		
—, etylalkoholu	137		
—, glukózy	137		
—, metánu	134, 137–8		
—, vodíka	90–1, 127, 131		
— —, ionizovaná	128		
—, vody	127, 132, 135, 137–9		
molekuly aminokyselín	138, 139		
N			
náboj, elementárny	19, 42, 56, 64, 73		
NEWTON I.	10, 15		
O			
oscilátor	26, 38, 105		
P			
parameter, skrytý	143		
PARMENIDES	13		
PASCAL B.	15		
PASCHEN F.	52, 60		
PAULI W.	67, 123, 165, 179		
perióda vlny	78, 86		
PERRIN J.	10, 59, 94		
PLANCK M.	11, 57, 60, 61		
podmienka, Braggova	79		
polomer Bohrov	34, 42		
pravdepodobnosť prechodu	142		
princíp korešpondencie	32, 36, 66		
—, Pauliho	113, 119, 121, 124		
—, superpozície	143, 146		
PRINGSHEIM E.	25, 60		
PTOLEMAIOVCI	9		
R			
RAYLEIGH LORD	62, 93		
RITZ W.	52, 57		
RÖNTGEN C.	63		
rovnica, Schrödingerova	147		
— —, bezčasová	111, 148, 150, 159		
RUBENS H.	25, 61		
RUTHERFORD E.	21, 64		
rýchlosť, fázová	78, 84		
—, grupová	84		
RYDBERG J. R.	57		
S			
SCHRÖDINGER E.	88, 100, 110, 171		
SEGNER J. A.	15		
séria, Balmerova	35		
SMOLUCHOWSKI M.	10		
SOMMERFELD A.	37, 38, 49, 109, 175		
spektrum, čiarové	30, 39, 51		
— —, Bohrovo vysvetlenie	31, 39		
—, vodíka	30, 37, 42		
stabilita atómov	21, 31, 98, 103		
stav, kvantový	12, 31, 39, 41, 70, 97, 113, 145		
STARK J.	52, 60		
STERN O.	90, 95		
SWAN W.	50		
T			
THOMSON G. P.	57, 89, 95		
THOMSON J. J.	13, 63		
TORRICELLI E.	15		
TOWNELEY R.	15		
U			
UHLENBECK G. E.	117, 125		
V			
vada šošovky, chromatická	49		
väzba, chemická	10, 100, 113, 127		
—, iónová	55, 127		
—, kovalentná	55, 127, 132		
vektor, vlnový	78, 84, 100		
VIVIANI V.	15		
vlna, monochromatická	78, 85		
— rovinná	26, 43, 78, 100, 145		
vlny, stojaté	76, 79, 86, 100, 105, 142		
— —, v dvoch rozmeroch	81		
— —, v jednom rozmere	79		
— —, v troch rozmeroch	83		
VOLTAIRE	10		
vzťah neurčitosti	141, 154		
W			
WEISSKOPF V.	18, 125		
WIEN W.	59, 62		
WOLLASTON W.	50, 56		
Y			
YOUNG T.	53, 92		
Z			
ZENÓN	13, 99		
Ž			
žiarenie, čierneho telesa	57, 60, 62, 93		
—, zahriatych telies	11, 24, 97		