

# Kvantová mechanika

## Úvod

Začátky moderní fyziky se datují do 17. století, kdy Isaac Newton (1643 – 1727) ve svých *Principiích* položil základy klasické mechaniky. Během 18. století a 1. poloviny 19. století se rozvinula optika a nauka o elektřině a magnetismu, ve 2. polovině 19. století pak teorie elektromagnetického pole a termodynamika. Na konci 19. století klasická fyzika dovedla popsat a vysvětlit většinu jevů, které byly bezprostředně přístupné smyslovému vnímání. Po vzniku kinetické teorie plynů se dokonce zdálo, že i atomy a molekuly (příliš malé na to, aby mohly být přímo pozorovány) se podřizují jejím zákonům. Není divu, že se vytvořila představa, že fyzika je uzavřenou vědeckou disciplínou a žádné nové převratné objevy už nelze očekávat.

Jak ale bylo možné díky stále dokonalejší experimentální technice pozorovat menší a menší **částice** a **vlnění** o stále kratších vlnových délkách, vyskytlo se už ve 2. polovině 19. století několik jevů, s jejichž vysvětlením měla klasická fyzika problémy. Historicky prvním významným selháním klasické teorie byla neschopnost objasnit naměřené (1860 – Gustav Robert Kirchhoff) křivky frekvenční závislosti spektrální hustoty energie rovnovážného tepelného záření. Teoretické vysvětlení podal až v roce 1900 Max Planck (1858 – 1947), avšak pouze za cenu klasické fyzice naprosto cizího předpokladu, že energie oscilátorů, kterými modeloval stěny dutiny s rovnovážným tepelným zářením, může nabývat jen určitých diskrétních hodnot, konkrétně celočíselných násobků Planckova kvanta energie

$$W = h \cdot f,$$

kde  $f$  je frekvence oscilátoru a  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  J.s je tzv. Planckova konstanta – viz kapitola **Záření absolutně černého tělesa**.

Planckovu hypotézu později zobecnil Albert Einstein (1879 - 1955) při objasňování dalších, pro klasickou fyziku nevysvětlitelných, jevů – fotoelektrického jevu (1905) a teplotní závislosti tepelných kapacit (1906). Podrobněji se zmíníme alespoň o prvním z nich.

## Fotoelektrický jev

Pro úplnost je nejprve potřeba poznamenat, že rozlišujeme fotoelektrický jev (dále jen fotoefekt) vnější a vnitřní. Při vnějším fotoefektu se působením záření elektrony ze vzorku uvolňují – dochází k tzv. fotoemisi, při vnitřním fotoefektu uvolněné elektrony setrvávají v látce a zvětšují její vodivost. Dále se budeme zabývat pouze vnějším fotoefektem, vnitřní byl objeven až po 2. světové válce a souvisí s rozvojem polovodičů.

Experimentálně fotoefekt objevil už v roce 1887 (tedy v době, kdy ještě celých 10 let zbývalo do objevu elektronu) Heinrich Rudolf Hertz. Pozoroval, že elektricky izolovaná zinková deska při osvětlení slunečním světlem ztrácí záporný elektrický náboj. Pozdější podrobná měření uskutečnil Philipp Lenard. Ukázal, že jev pozorovaný Hertzem spočívá v odvedení „záporné elektřiny“ z povrchu kovu vlivem ultrafialového záření. Teprve z dalších výzkumů (1897 - objev elektronu Josephem Johnem Thomsonem) vyplynulo, že při fotoefektu se z látky uvolňují elektrony. Na tom by nebylo nic divného, podivné byly až pozorované zákonitosti jevu.

1. Při osvětlení monochromatickým světlem mají všechny uvolněné elektrony stejnou energii.
2. Zvyšujeme-li intenzitu dopadajícího světla, nemění se energie uvolněných elektronů, ale roste jejich počet.

- Kinetická energie uvolněných elektronů závisí pouze na frekvenci dopadajícího světla (čím je frekvence vyšší, tím mají elektrony větší energii). Pro každý kov přitom existuje jistá hraniční frekvence a světlo s frekvencí nižší, než je ta hraniční, elektrony z povrchu kovu neuvolní, ať je jeho intenzita jakkoliv vysoká.
- K fotoefektu vždy dochází ihned po dopadu světla na vzorek.

Ve skutečnosti pokusy P. Lenarda nebyly dostatečně přesné, aby přesvědčivě ukázaly všechny výše uvedené závěry. Přesná měření pocházejí až od Roberta Andrewse Millikana, který v letech 1911 – 1915 experimentálně ověřoval Einsteinovu rovnici fotoefektu (viz dále) a studiem fotoefektu na sodíkové katodě určoval velikost Planckovy konstanty.

V rámci klasických představ o vzájemném působení elektromagnetického záření a elektronů v kovech nebylo možné výše uvedené experimentální závěry vysvětlit. (Klasická teorie předpokládala, že fotoefekt je způsoben rezonancí kmitů elektronů v kovu s dopadajícím zářením. Pak by ale kinetická energie, s níž elektrony opouštějí kov, závisela na intenzitě dopadajícího světla a fotoefekt bychom pozorovali až určitou dobu po dopadu světla na vzorek.)

Velmi jednoduché a elegantní vysvětlení, které navazuje na Planckovu kvantovou hypotézu, podal v roce 1905 Albert Einstein. Jeho ústředním motivem jsou nedělitelné „světelné částice“ s energií  $h \cdot f$ , které byly později (1926 – Gilbert Newton Lewis) nazvány **fotony**. Při fotoefektu je podle A. Einsteina jeden foton pohlcen jedním elektronem a elektron tak získá energii  $h \cdot f$ . Část této energie spotřebuje na uvolnění se z kovu (tzv. výstupní práce  $W_A$ ), část mu zbyde ve formě kinetické energie  $W_k$ . Matematický zápis tzv. **Einsteinovy rovnice fotoelektrického jevu** má tedy tvar

$$h \cdot f = W_A + W_k .$$

Všimněte si, že z Einsteinova vztahu skutečně plynou všechny experimentální výsledky:

- energie uvolněných elektronů nezávisí na intenzitě dopadajícího světla (tedy počtu fotonů), ale jen na jeho frekvenci (tedy energii fotonů);
- s rostoucí frekvencí dopadajícího světla roste kinetická energie uvolněných elektronů;
- k fotoefektu dochází ihned po dopadu světla na vzorek.

Za povšimnutí stojí i skutečnost, že Nobelova cena za fyziku byla A. Einsteinovi v roce 1921 udělena právě za tuto jednoduchou rovnici fotoefektu (a Brownův pohyb), a ne za jeho vrcholné dílo – teorii relativity.

## Comptonův jev

Z experimentů, s nimiž si klasická fyzika nevěděla rady a byly předzvěstí fyziky kvantové, kromě fotoefektu a rovnovážného tepelného záření za zmínku určitě stojí i jev, který v letech 1922 – 1923 experimentálně prozkoumal a následně teoreticky vysvětlil Arthur Holly Compton. Při studiu rozptylu rentgenového záření na grafitu, parafínu a dalších látkách, v nichž jsou elektrony slabě vázány, zjistil, že:

- Rozptýlené záření obsahuje kromě vlnových délek dopadajícího záření  $\lambda_0$  i větší vlnové délky  $\lambda$ .
- Spektrální posun  $\lambda - \lambda_0$  se mění s rozptylovým úhlem  $\varphi$  (tj. úhlem, pod kterým je rozptýlené rentgenové záření detekováno) podle vztahu

$$\lambda - \lambda_0 = A (1 - \cos \varphi),$$

kde  $\lambda = 2,4262 \cdot 10^{-12}$  m je tzv. Comptonova vlnová délka, nezávisí však ani na materiálu vzorku ani na vlnové délce dopadajícího záření.

7. Se zvětšováním protonového čísla atomů vzorku klesá intenzita posunutých spektrálních čar a roste intenzita spektrálních čar neposunutých.

S představami klasické fyziky o interakci záření s látkou (viz klasická představa o fotoefektu) se neslučuje jak samotná existence posunutých vlnových délek v rozptýleném záření tak ostatní experimentální výsledky. A. H. Compton všechny výše uvedené zákonitosti vysvětlil na základě představy, podle níž opět jediné kvantum energie  $h \cdot f$  (a odpovídající hybnosti  $h \cdot f / c$ ) záření interaguje s jediným elektronem, přičemž platí z klasické fyziky dobře známé zákony zachování energie a hybnosti. Za objasnění (při němž nezávislým způsobem dospěl k témuž vztahu pro kvantum energie elektromagnetického záření jako A. Einstein) efektu nazvaného po něm byla A. H. Comptonovi v roce 1927 udělena Nobelova cena.

Při studiu klasické fyziky jsme se naučili na světlo pohlížet jako na elektromagnetické vlnění (s vlnovou délkou  $\lambda$ ), které je kombinací elektrického a magnetického pole, z nichž každé se mění s frekvencí  $f$ , která je s rychlostí šíření  $c$  a vlnovou délkou  $\lambda$  spojena vztahem  $c = \lambda \cdot f$ . Po úspěšném teoretickém popisu fotoefektu a Comptonova jevu je zřejmé, že při emisi či absorpci světla látkou se energie nepředává spojitě (tedy po libovolně velkých porcích), ale pouze po malých kvantech energie  $h \cdot f$  – fotonech. Zdá se podivné, že se světlo může chovat jako vlnění a přesto při interakci s látkou vznikat nebo zanikat po kvantech. Kvantová povaha interakce elektromagnetického záření s látkou do klasické teorie elektromagnetického pole nijak nezapadá. Zdaleka to však není jediná podivnost, která nás na cestě do mikrosvěta čeká.

## Model atomu

V 1. polovině 20. století existovaly i experimentální výsledky, které nebylo možné vysvětlit jen pomocí této kvantové hypotézy. Již v minulém století byl znám vzorec pro vlnové délky spektrálních čar vodíku (1885 – J. J. Balmer). Teoreticky jej objasnil v roce 1913 Niels Bohr, ovšem jen za cenu dalších neklasických postulátů. Než se ale pustíme do Bohrovy teorie atomu vodíku, shrňme si stručně, co se v té době o struktuře látek vědělo.

Už 400 let př. n. l. řecký filozof Demokritos z Abdér učil, že vše se skládá z drobných neměnných částic – atomů (řecky *atomos* = nedělitelný). Starověcí atomisté však uvažovali čistě spekulativně, tzn. neopírali se o žádná pozorování. Celý středověk pak ovládlo naopak učení Aristotelovo, neboť mělo podporu církve. Podle něho byly látky neomezeně dělitelné. Atomisté nad zastánci spojitě struktury látek definitivně zvítězili až v nedávné historii. Mezníkem je rok 1908, kdy Jean Baptiste Perrin provedl důkladnou teoretickou a experimentální analýzu Brownova pohybu (neustálý chaotický pohyb malých částíček rozptýlených v kapalině nebo plynu, který roku 1827 náhodně objevil při zkoumání vodní suspenze pylových zrněk botanik Robert Brown). Z nadějně hypotézy o **částicové struktuře látek** se tak stala (všeobecně přijatá) jistota.

Skutečnost, že jednotlivé atomy zahřátých zředěných plynů emitují elektromagnetické záření (známá už ve 2. polovině 19. století), a především pak objev přirozené radioaktivity (1896 - Henri Becquerel) znamenaly, že atomy nejsou nedělitelné, jak předpokládali starověcí atomisté, ale mají nějakou vnitřní strukturu. Důležitým mezníkem při hledání vnitřního uspořádání atomů byl rok 1911, kdy Ernest Rutherford na základě tzv. rozptylových experimentů (rozptyl svazků rychlých  $\alpha$ -částic dopadajících kolmo na velmi tenkou zlatou fólii) dospěl k tzv. **jadernému, resp. Rutherfordovu modelu atomu**. Podle něho je v centru atomu velmi malé (s poloměrem minimálně o čtyři řády menším než celý atom) těžké (99,95 % hmotnosti atomu) kladně nabitě jádro obklopené rozlehlým lehkým záporně nabitým obalem. Zbývalo vysvětlit stabilitu takového atomu (proč se lehký elektronový obal nezhroutí na jádro, k němuž ho přitahuje kulombovská síla) a popsat jej z dynamického

hlediska. Právě to se ale ukázalo být pro klasickou fyziku dalším nerozlousknutelným oříškem.

Nejpřirozenější bylo využít stejnou prostorovou závislost kulombovské a gravitační síly ( $F \sim 1/r^2$ ) a opřít se o analogii s planetárními systémy. Tzv. **planetární model atomu** by však nebyl stabilní (podle elektrodynamiky náboj, který se pohybuje se zrychlením, emituje elektromagnetické záření; elektron obíhající kolem jádra podobně jako planety kolem Slunce by tedy ztrácel energii a postupně padal na jádro). Spektra atomů by navíc nebyla v souladu s experimenty čárová ale pásová. Také by neexistoval žádný důvod, proč by chladné plyny neměly zářit nebo proč by atomy téhož druhu měly být identické.

Mnohem nadějnější byla už zmíněná **Bohrova teorie atomu vodíku**. S odkazem na Planckovu kvantovou hypotézu a její zobecnění A. Einsteinem v roce 1913 Niels Bohr (1885 – 1962) vyšel z klasického popisu objektů a doplnil jej dvěma odvážnými postuláty:

I. Atom se může nacházet jen v určitých diskrétních stavech s energiemi  $W_n$ , v nichž může setrvávat, aniž by se měnila jeho energie.

(Výběr těchto stavů odpovídá tzv. Bohrově kvantovací podmínce, podle níž elektron může mít pouze zcela určité hodnoty velikosti momentu hybnosti rovné celočíselnému násobku tzv. redukované Planckovy konstanty  $\hbar = h/2\pi$ . Této podmínce pak odpovídají i zcela určité vzdálenosti od jádra  $r_n$ , v nichž se elektron může nacházet, a jim odpovídající určité hodnoty rychlosti elektronu  $v_n$ .)

II. Při přechodu atomu ze stavu s energií  $W_n$  do stavu s energií  $W_m$  se vyzáří, resp. pohltí jediné kvantum energie elektromagnetického záření s frekvencí  $f$  danou vztahem

$$h \cdot f = |W_n - W_m|.$$

Díky těmto postulátům N. Bohr dokázal „vysvětlit“ celou řadu experimentálních výsledků, s nimiž si dosavadní teorie nevěděly rady:

1. atomy jsou stabilní,
2. spektra atomů jsou čárová,
3. chladné plyny nezáří,
4. atomy téhož druhu jsou identické a po nejrůznějších změnách fyzikálních podmínek se opět dokáží vrátit do původního stavu.

Neméně důležitá je i skutečnost, že Bohrova teorie postavila na vědecký základ chemii. V té době už se vědělo, že některé prvky mají velmi podobné chemické vlastnosti, i když se liší atomovými hmotnostmi – viz **Mendělejevova periodická tabulka**. Základem Bohrovy koncepce je postupné přidávání elektronů k jádru atomu: Nehledě na hmotnost jádra, první elektron musí být v souladu s principem minimální energie v energetickém stavu odpovídajícím základnímu stavu vodíku. Druhý elektron zaujme podobný energetický stav a výsledná konfigurace tedy připomíná atom helia. Další přidaný elektron už musí putovat na vyšší energetickou hladinu. Takže v atomu se třemi protony v jádře a třemi elektrony v obalu (lithium) by měly být dva z těchto elektronů k jádru vázány silněji a zbylý elektron slaběji. Takový atom by se tedy při chemických procesech měl chovat víceméně jako atom s jedním elektronem – vodík. A lithium skutečně jistou chemickou podobnost s vodíkem vykazuje. Dalším prvkem s chemickými vlastnostmi podobnými lithiu je sodík s jedenácti protony v jádře. Na druhé energetické hladině tedy musí být k dispozici osm míst a jakmile je všech těchto osm míst obsazeno, další (v pořadí už jedenáctý) elektron musí putovat na ještě vyšší energetickou hladinu. Zde je k jádru vázán nejslaběji ze všech elektronů a výsledná

konfigurace proto opět připomíná atom s jediným elektronem. Energetické hladiny atomu bývají označovány jako **slupky** a v tuto chvíli si je opravdu jako na sobě nabalené slupky cibule můžete představit.

Z chemického hlediska je důležitý především počet elektronů v nejvyšší slupce a (prozatím pro nás nevysvětlitelná) skutečnost, že zcela zaplněné slupky jsou nejstabilnější. Chemické reakce lze potom vysvětlit jako sdílení nebo výměnu elektronů, což jednotlivé atomy praktikují v souladu se svojí potřebou co nejvíce se přiblížit ke stavu se zcela zaplněnou vnější slupkou. Takže vytvoří-li molekulu např. dva vodíkové atomy, své dva elektrony využívají společně tak, že se oba těší z uzavřené slupky. Helium, jehož slupka už zaplněna je, naproti tomu do chemických reakcí nevstupuje. Nyní díky Bohrově teorii lépe chápeme uspořádání prvků v periodické tabulce nebo chemické reakce, nevíme však **proč** může první slupka obsahovat nejvýše *dva* elektrony, druhá nejvýše *osm* elektronů, a tak dále.

Bohrova teorie atomu vodíku se následně stala základem tzv. staré kvantové teorie vypracované v letech 1913 – 1924 především N. Bohrem, A. Sommerfeldem a W. Wilsonem. Ani ta však nedokázala popsat spektra složitějších atomů, ani vysvětlit např. různé intenzity jednotlivých spektrálních čar atomu vodíku. Začínalo být zřejmé, že k vytvoření konzistentní teorie, která by popisovala chování mikroobjektů, bude třeba zásadnějších změn, než je doplňování hypotéz do klasické fyziky.

Správný - **kvantověmechanický model atomu** je tedy prozatím v nedohlednu. Bohrovy úspěchy při poznávání atomové struktury však natolik výrazně stimulovaly vývoj fyziky směrem k moderní kvantové teorii, že za ně N. Bohr v roce 1922 právem získal Nobelovu cenu.

## Vlnově – částicový dualismus

Zatím jsme se setkali se skutečností, že elektromagnetické vlnění se při interakci s látkou může chovat jako proud částic (fotonů). Když se ale může vlnění někdy chovat jako proud částic, proč by se i svazek částic někdy nemohl chovat jako vlnění? Právě této symetrie se dovolával Louis de Broglie (1892 – 1987), když v roce 1924 vyslovil odvážnou hypotézu. (Mimochodem, fyzici jen zřídkakdy udělali chybu, když v přírodních zákonitostech předpokládali symetrii.)

**De Broglieho hypotéza** se dnes zpravidla formuluje následujícím způsobem:

S každou částicí, která má určitou hybnost  $p$ , je spojena (rovinná monochromatická) vlna s vlnovou délkou  $\lambda = h/p$ , kde  $h$  je Planckova konstanta.

V současné době už se vlnové povaze hmoty diví málokdo – běžně se používá např. difrakce elektronů (nebo neutronů) při studiu atomové struktury pevných látek a kapalin. Ve 20. letech 20. století však byla skutečnost, že s postupným pronikáním do zákonitostí mikrosvěta začíná mizet ostrá hranice mezi částicemi a vlněním, na níž jsme byli zvyklí z makrosvěta, přinejmenším znepokojující. Tato nezvyklá skutečnost dokonce dostala svůj název, a to **vlnově – částicový dualismus**. Znamená, že jeden a tentýž objekt mikrosvěta se může za jistých okolností chovat *jako částice* a za jiných *jako vlna*, sám o sobě ale není ani částicí ani vlnou. Proto také v dalším textu budu raději pro objekty mikrosvěta používat speciální označení **mikroobjekt**.

V roce 1924 ale ještě ani samotný autor hypotézy L. de Broglie nevěděl jakou povahu výše zmíněné „vlnění spojené s částicí“ má a jakým způsobem je s částicí spojeno. To upřesnila až kvantová mechanika, která vznikla v letech 1925 – 1927 zásluhou především Wernera Karla Heisenberga a Erwina Schrödingera.

## Kvantová mechanika

Kvantová mechanika vlnu spojenou s mikroobjektem nazvala **vlnovou funkcí**, přisoudila jí dnes obecně uznávanou **pravděpodobnostní** (nebo též **kodaňskou**) **interpretaci**

Vlnová funkce  $\psi(\mathbf{r};t)$  nemá žádný fyzikální význam, ten má až výraz  $|\psi(\mathbf{r};t)|^2$ , který udává pravděpodobnost nalezení mikroobjektu v čase  $t$  v nekonečně malém objemu se středem v místě s polohovým vektorem  $\mathbf{r}$ .

a pověřila ji zadáváním stavu mikroobjektu. Fyzikální veličiny jsou v kvantové mechanice reprezentovány tzv. **operátory**, které „operují“ na prostoru těchto vlnových funkcí. Hluběji se zde do poměrně složitěho matematického aparátu kvantové teorie nořit nebudeme, jen pro představu uvedu, že na základě znalosti vlnové funkce v nějakém konkrétním časovém okamžiku  $\psi(\mathbf{r};t_0)$  lze pomocí pohybové rovnice (tzv. obecná Schrödingerova rovnice) dospět ke tvaru vlnové funkce v libovolném pozdějším okamžiku  $\psi(\mathbf{r};t)$  a na základě ní pak předpovědět chování daného mikroobjektu. Podstatné je, že tato předpověď má vždy pouze **pravděpodobnostní charakter**. Nemůžeme tedy např. zjistit, kde přesně se bude mikroobjekt nacházet, pouze s jakou pravděpodobností ho kde najdeme. Další nepříjemností je skutečnost, že kvantověmechanická vlnová funkce se nevyvíjí pouze podle Schrödingerovy rovnice, ale při většině měření se mění skokem a to navíc zcela nedeterministicky. Dále uvidíme, že pravděpodobnostní charakter předpovědí a náhlá změna stavu mikroobjektu při měření jsou zdrojem mnoha podivných skutečností. Poctivé odvození všech jevů, s nimiž se nyní seznámíte, neboť jsou pro mikrosvět typické, by tento text neúnosně prodloužilo. Omezíme se proto pouze na jejich stručný popis.

Jedním z typických kvantověmechanických jevů je **kvantování hodnot fyzikálních veličin**, s nímž už jsme se v úvodních partiích této kapitoly setkali. Omezíme se pouze na kvantování hodnot energie, které nám pomůže dále rozvíjet představu o atomech. Z matematického aparátu kvantové mechaniky plyne, že mikroobjekt uvězněný v omezené části prostoru se může nacházet pouze ve stavech  $\psi_n$  ( $n=1,2,\dots$ ), v nichž má odpovídající zcela určité kvantované hodnoty energie  $W_n$ . Stav s nejmenší možnou hodnotou energie (tzv. základní stav)  $W_1$  je přitom vždy ostře větší než nula. To ale znamená, že vázaný mikroobjekt může získat nebo ztratit jen zcela určité množství energie, má-li se dostat do jiného stacionárního stavu. I elektron v atomu vodíku (nejjednodušší atom složený z jediného protonu v jádře a jediného elektronu v obalu) lze proto najít pouze v jednom z diskrétních kvantových stavů s přesně definovanou energií, přičemž podle principu minimální energie elektron vždy preferuje stav základní. Získá-li elektron odpovídající množství energie, může přeskóčit do stavu vyššího (tzv. excitovaného), tam však nezůstane, ale rychle přejde na některou z nižších energetických hladin. Při tom se vždy pohltí resp. vyzáří odpovídající kvantum energie (nejčastěji ve formě fotonu). Potom ale není divu, že chladné plyny (jejichž atomy jsou v základním stavu) nezáří (žádný nižší stav, do něhož by mohly přejít, neexistuje) nebo že atom může absorbovat nebo emitovat jen takový foton, jehož energie  $h\nu$  se rovná rozdílu energií elektronu v počátečním a koncovém stavu. (Objasnění ostatních experimentálních výsledků uvedených v části nazvané **Model atomu** už jistě zvládnete sami.)

Pokud by nás navíc zajímalo, kde se elektrony v atomovém obalu nacházejí, z vlnových funkcí stacionárních stavů bychom zjistili, že elektron bude s největší pravděpodobností detekován ve vzdálenostech od jádra  $r_n$ , které odpovídají Bohrovu modelu atomu vodíku, s nenulovou pravděpodobností jej ale můžeme najít (i když s postupně klesající pravděpodobností) i v okolí Bohrem předpovězených vzdáleností od jádra. Postupně se nám tak rýsuje **kvantověmechanický model atomu**. Pro začátečníka je přirozeně těžké představovat si subatomární částice tímto pravděpodobnostním způsobem. Problém spočívá v našem přirozeném nutkání vidět elektron jako malinkou kuličku, nacházející se v určitém

čase na určitém místě a pohybující se po dobře definované trajektorii. Jenomže ani elektrony ani ostatní subatomární částice takové prostě nejsou. Atom vodíku v základním stavu si lze představit nanejvýš jako rozmazanou kouli, každopádně bez ostře definované hranice a bez jakéhokoliv náznaku orbit připomínajících planetární systém. (Představa atomu vodíku v některém z excitovaných stavů je ještě složitější.)

Kvantová mechanika také jasně ukázala, že pro každý elektron v atomu existuje hned čtveřice kvantových čísel (z nichž každé souvisí s kvantováním hodnot nějaké fyzikální veličiny):

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, \dots \quad (\text{odpovídá slupkám K, L, } \dots), \\ l &= 0, 1, \dots, n-1 \quad (\text{odpovídá tzv. podslupkám s, p, d, f, } \dots), \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \\ m_s &= \pm \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Počet elektronů v každé zaplněné slupce pak přesně odpovídá nejvyššímu možnému počtu odlišných souborů kvantových čísel příslušejících této slupce (K slupka – max. 2 elektrony ve stavu 1s; L slupka – max. 8 elektronů ve stavech 2s a 2p, ...). Na tomto základě (už v roce 1925) Wolfgang Pauli formuloval tvrzení, které dnes známe jako **Pauliho vylučovací princip**:

V jednom atomu nemohou mít žádné dva elektrony tentýž soubor kvantových čísel.

Tento princip elegantně vysvětluje, proč se s narůstající hmotností atomů postupně zaplňují vyšší a vyšší slupky. Nutno ještě dodat, že z výše uvedených zákonitostí plynoucí výstavbový princip

K ... 1s  
L ... 2s 2p  
M ... 3s 3p 3d  
N ... 4s 4p 4d 4f ...

neodpovídá realitě, neboť nebere v úvahu vzájemné ovlivňování elektronů v atomovém obalu. V souladu s požadavkem minimální energie je až z chemie dobře známé uspořádání

1. perioda Mendělejevovy tabulky ... **1s**
2. perioda Mendělejevovy tabulky ... **2s 2p**
3. perioda Mendělejevovy tabulky ... **3s 3p**
4. perioda Mendělejevovy tabulky ... **4s 3d 4p**
5. perioda Mendělejevovy tabulky ... **5s 4d 5p**
6. perioda Mendělejevovy tabulky ... **6s 4f 5d 6p**
7. perioda Mendělejevovy tabulky ... **7s 5f 6d 7p**

Ke kvantové teorii neodmyslitelně patří i **Heisenbergův princip neurčitosti**, který v roce 1927 postuloval W. K. Heisenberg a který nám „předpovídání budoucnosti“ ještě více komplikuje. Nejznámější z relací neurčitosti např. říká, že čím přesněji jsme schopni určit *polohu*  $r$  mikroobjektu, tím méně přesně lze určit jeho *hybnost*  $p$  a naopak. Pro neurčitosti všech kartézských složek vektorů polohy a hybnosti totiž platí relace:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h/4\pi.$$

Mnozí experimentátoři se v té době domnívali, že jejich pokusy jen nejsou dostatečně přesné, aby umožnily současně dostatečně přesně změřit jak polohu, tak hybnost mikroobjektů. Tak tomu ale není. Polohu a hybnost mikroobjektu nelze současně přesně měřit v principu (tzn. ať jsou naše měřicí přístroje jakkoliv přesné). Sám W. K. Heisenberg se princip neurčitosti snažil ospravedlnit zhruba následovně: Věci můžeme spatřit pouze tehdy, když se na ně podíváme, a k tomu je třeba, aby se fotony světla odrazily (přímo nebo přes nějaké experimentální zařízení) od těchto věcí do našich očí. Jedná-li se o nějaký velký objekt, odraz fotonu jej nemůže vážně narušit, takže neočekáváme, že bychom např. dům nějak ovlivnili jen tím, že se na něj podíváme. Například elektron je ale tak malý, že musíme při jeho pozorování použít elektromagnetické vlnění o krátké vlnové délce  $\lambda$ . Fotony takového (např. gama) vlnění, ale mají velkou energii ( $W = h.c/\lambda$ ), proto polohu a hybnost elektronu značně změní. Podle klasické fyziky je možné předpovědět průběh všech budoucích událostí, pokud budeme znát polohu a hybnost každé částice ve vesmíru. Podle kvantové fyziky takové dokonalé předpovídání budoucnosti nepřipadá v úvahu, neboť přesnou polohu a hybnost byt' jedné jediné částice z principu znát nemůžeme.

Jistě jste (i když možná ne v souvislosti s fyzikou) slyšeli i o dalším důsledku kvantové teorie, kterým je tzv. **tunelový jev**. Podle klasické fyziky se částice nikdy nemůže dostat přes potenciálovou bariéru, jejíž výška je větší než energie částice (od takové bariéry se klasická částice vždy odrazí). Naproti tomu mikroobjekt může takovou bariérou „protunelovat“. Pravděpodobnost, že mikroobjekt o hmotnosti  $m$  a energii  $W$  projde bariérou o výšce  $V$  a tloušťce  $a$  je dána tzv. koeficientem průchodu

$$T \sim e^{-2\kappa a},$$

kde  $\kappa^2 = 8\pi^2m(V-W)/h^2$ .

Doplňováním různých hodnot si sami můžete vyzkoušet, při jakých parametrech je tunelování dobře patrné a při jakých je pravděpodobnost protunelování bariérou zanedbatelně malá. Tunelování má mnoho praktických aplikací. Za všechny zmíním tunelovou diodu, ve které je možné rychle zapnout a vypnout proud tunelujících elektronů změnou výšky bariéry, a rastrovací tunelový mikroskop, který je schopný zobrazit detaily atomových rozměrů. Důsledkem tunelového jevu je ale např. i přirozený  $\alpha$ -rozpad jader.

Na kodaňské interpretaci kvantového světa je ale podle mého názoru nejpodivuhodnější skokem (a navíc nepředvídatelně) se měnící stav mikroobjektu při měření - tzv. **kolaps vlnové funkce**. Abychom si jej mohli vysvětlit, musíme si nejprve říct alespoň něco málo o tzv. *principu superpozice*. Podle matematického aparátu kvantové mechaniky lze libovolný obecný stav  $\Psi$  mikroobjektu napsat jako lineární kombinací tzv. vlastních stavů  $\psi_n$  ( $n=1,2,\dots$ ) operátoru, který reprezentuje veličinu, jejíž možné hodnoty nás zajímají (konkrétně uvažujme opět např. energii):

$$\Psi = c_1.\psi_1 + c_2.\psi_2 + c_3.\psi_3 + \dots$$

Každému vlastnímu stavu  $\psi_n$  odpovídá tzv. vlastní hodnota příslušné fyzikální veličiny  $W_n$ , kterou naměříme vždy, když mikroobjekt bude ve stavu  $\psi_n$ . Pokud ale mikroobjekt bude v obecném stavu  $\Psi$ , lze naměřit libovolnou z vlastních hodnot, a to s pravděpodobností rovnou výrazu  $|c_i|^2$ . Kterou z alternativních možností skutečně naměříme je tedy otázkou náhody. Jisté ale je, že pokud měřicí přístroj ukáže hodnotu  $W_n$ , vlnová funkce  $\Psi$  se skokem změní (zkolabuje) na příslušnou vlastní funkci  $\psi_n$ . Zdá se, jako by si svět ponechával všechny své možnosti volby (tedy všechny pravděpodobné cesty vývoje) otevřené, a až skutečnost, že



nějaký systém pozorujeme, tento systém přinutí, aby si vybral jednu z možností, které jsou mu otevřeny, a ta se pak stává realitou. Jinými slovy: Nic není skutečné, dokud se na to nepodíváme (a přestává to být skutečným, jakmile se přestaneme dívat). Sotva pak překvapí, že mnozí uznávají fyzikové včetně A. Einsteina se po celá desetiletí pokoušeli nalézt způsob, jak by šlo tuto interpretaci kvantové mechaniky obejít. Nikdo z nich však neuspěl. Naopak, každý další útok na kodaňskou interpretaci kvantové mechaniky jen posílil její postavení.

Samotný A. Einstein považoval za vůbec „nejhezčí způsob“, jakým lze ukázat, že vlnová představa hmoty je neúplným zobrazením skutečnosti, záhadu Schrödingerovy kočky. Podle Schrödingerova původního návrhu postačí, představíme-li si krabici, která obsahuje radioaktivní látku, detektor schopný zaznamenat přítomnost radioaktivního záření, skleněnou láhev s jedovatým plynem (např. kyanovodíkem) a konečně živou kočku. Aparatura uvnitř krabice je sestavena tak, že detektor bude zapnut právě tak dlouho, aby byla padesátiprocentní šance, že jeden z radioaktivních atomů se rozpadne, což detektor okamžitě zaznamená. Zaznamená-li detektor takový jev, láhev s jedovatým plynem se rozbije a kočka uhyne; pokud nikoli, kočka zůstane naživu. Ale dokud krabici neotevřeme a nepodíváme se dovnitř, žádným způsobem se nemůžeme dozvědět, jaký byl výsledek tohoto pokusu, protože k radioaktivnímu rozpadu dochází zcela náhodně. Dokud se nepodíváme, kočka je i není živá a je i není mrtvá, neboli, je současně částečně živá i mrtvá. A až se podíváme, zkolabuje tato superpozice dvou možných stavů do jednoho z nich – uvidíme, že kočka je buď živá nebo mrtvá.

Pokud jste po tomto letmém nahlédnutí do kvantové teorie zcela zmatení z mikroobjektů, které nejsou ani částicemi ani vlnami, a o nichž jen matně tušíme, kde se vlastně nacházejí a co podivného tam dělají, mohlo by vás utěšit (či potěšit) tvrzení jednoho z největších fyziků 20. století Richarda Phillipse Feynmana (1918 – 1988), že kvantové mechanice nerozumí nikdo, ani sami její autoři. Nakonec i už několikrát zmíněný N. Bohr říkával, že pokud nejste z kvantové teorie zmatení, pak ji asi úplně nechápete. Pravdou ovšem je, že kvantová teorie zatím obstála v každém experimentálním testu (a že už jich bylo). Pokud se přes všechny obtíže přece jen rozhodnete do kvantové teorie hlouběji proniknout, čeká vás bezpochyby velké dobrodružství, na konci kterého budete odměněni např. pochopením podstaty všech chemických (i biochemických) zákonitostí nebo odpověďmi na otázky typu: Jak funguje laser, popř. tranzistor a další mikroelektronické prvky? Proč měď vede elektrický proud a sklo nikoliv? Čímž jsme se od podivného **mikrosvěta** nenápadně dostali zpět do nám dobře známého **makrosvěta**. Ve skutečnosti existuje celá řada makroskopických vlastností látek, které jsou zapříčiněny skutečností, že jejich stavební částice podléhají zákonům kvantové mechaniky (kromě již zmíněné různé elektrické vodivosti pevných látek např. teplotní závislost tepelných kapacit pevných látek, radioaktivita, supravodivost, supratekutost). Navíc platnost zákonů kvantové mechaniky není omezená pouze na mikrosvět. Kvantová teorie je obecnější než teorie klasická, proto lze (i když o mnoho složitěji) pomocí ní popisovat i makrosvět. Na pomezí mikrosvěta a makrosvěta se pak obě teorie potkávají - předpovídají stejné výsledky (jde o tzv. princip korespondence).