# Orbitaly atomu vodíku

Pro 2. ročník učitelského studia - Kvantová mechanika (UFY100)

## 1. Než začneme

K vypracování nasledujících úkolů budete potřebovat speciálně připravené aplikace. Z adresy `http://kdf.mff.cuni.cz/~broklova/vyuka/orbitaly/` si stáhněte si zazipovaný archív `orbitaly.zip` (např. kliknutím pravým tlačítkem myši na příslušný odkaz a volbou `Uložit jako`). Tento archív rozbalte do libovolně zvoleného adresáře.

Aplikace byly naprogramovány v prostředí LabVIEW. K jejich spuštění je třeba nainstalovat knihovny tohoto prostředí. Poklepáním spusťte program `LVRunTimeEng_7.0.exe` a dále postupujte dle pokynů instalačního programu (v zásadě jde o opakované mačkání tlačítka `Next`). Pozor, tyto knihovny nefungují pod Windows98 a k jejich instalaci musíte mít administrátorská práva.

Teď už by mělo jít spustit jednotlivé programy. Pokud ne, ozvěte se co nejdříve, abychom problém vyřešili. Uvedené aplikace slouží ke zobrazovaní funkcí, které budete potřebovat, ale také k tomu, abyste si sami zkontrolovali, zda je vaše řešení určitých úloh správné.

Dále najdete na těchto stránkách zadání úkolů a výklad malých kousků teorie. Prosím, **zapisujte pečlivě** veškeré výsledky, hypotézy, nápady, **nebojte se dělat chyby**, používat „jednoduchá slova“, popisovat i nepřesné představy. Cílem těchto pracovních listů není odhalit mezery ve vašich znalostech (koneckonců se s daným tématem teprve seznamujete, takže ho vlastně ani nemůžete znát), ale zjistit, zda se pomocí podobných úloh dá zlepšit porozumění daným grafům.

I když to asi bude pro vás náročné, **zpracovávejte postupně** jednotlivé úkoly a nečtěte si dopředu vysvětlení, řešení a zadání dalších úkolů dřív než pečlivě promyslíte a zaznamenáte svoje řešení dané úlohy. Pokud budete chtít připsat ještě nějaký nápad později k již dříve řešené úloze, klidně to udělejte.

Místo na zaznamenávání je vynecháno přímo v tomto textu a označeno vlevo svislou čarou. Pokud by bylo místa málo, použijte další papír/y.

## 2. Sférické souřadnice

Pro řešení stacionární Schrödingerovy rovnice atomu vodíku je velmi výhodné použít **sférické souřadnice**. Věnujme teď pár minut tomu, že si připomeneme jejich vlastnosti.

definice:
$$x = r\sin\vartheta\cos\varphi$$
$$y = r\sin\vartheta\sin\varphi$$
$$z = r\cos\vartheta$$

Při řešení a pro kontrolu úloh v této kapitole můžete použít aplikaci `3D_poloprimka.exe`. Tento program zobrazuje polopřímku, která je zadána pomocí úhlu $\vartheta, \varphi$. Oba úhly můžete měnit pomocí dvou posuvníků („šoupátek“) nahoře nad grafem.

2.1.) Vyzkoušejte si v tomto programu, co dělá změna obou úhlů.

2.2.) Nakreslete obrázek, který odpovídá naší definici sférických souřadnic a vyznačte do něj souřadnice $x, y, z, r, \vartheta, \varphi$. Slovně popište význam sférických souřadnic a určete, jakých hodnot nabývají:

a) $r \ldots$
b) $\vartheta \ldots$
c) $\varphi \ldots$

Pokuste se následující úlohy vyřešit úvahou. Pokud se vám to nebude dařit, použijte uvedený program. Zkusmo nastavte pohyblivou polopřímku do požadované pozice a odečtěte hodnoty úhlů.

2.3.) V kartézských souřadnicích je osa $x$ popsána podmínkou, že $y = 0, z = 0$. Jak bude tato podmínka vypadat ve sférických souřadnicích zapsaná pomocí úhlů? Napište tyto podmínky pro všechny tři kartézské osy.

a) osa $x$:
b) osa $y$:
c) osa $z$:

2.4.) Podobně jako v předchozím úkolu popište následující roviny:

a) rovina $xy$ (tj. rovina daná podmínkou $z = 0$)
b) rovina $xz$
c) libovolná rovina obsahující osu $z$

2.5.) Jaký geometrický útvar tvoří všechny body, které

a) mají stejnou danou souřadnici $r$, ale liší se ve $\vartheta, \varphi$?
b) mají stejnou danou souřadnici $\vartheta$
c) mají stejnou danou souřadnici $\varphi$

2.6a.) Jestliže nějaká (skalární) funkce prostorových souřadnic nezávisí na $r$, co to pro ni znamená? Jak vypadají místa, kde má tato funkce stejnou hodnotu?

2.6b.) Vyřešte předchozí úlohu i pro funkci nezávislou na $\vartheta$, $\varphi$, resp. nezávislou na obou úhlech.

Až budete se svými výsledky v této kapitole spokojeni, podívejte se na konec pracovních listů, kde jsou uvedeny stručně správné odpovědi. Pokud se vaše řešení liší, zkuste zjistit, zda jste v něčem udělali chybu (něco přehlédli) nebo zda jste prostě uvažovali jinak. Mohou existovat i jiná správná řešení.

# 3. Vlnové funkce stacionárních stavů atomu vodíku

Vlnová funkce popisující stacionární stav atomu vodíku se dá napsat jako součin tří funkcí, přičemž každá její část závisí pouze na jedné sférické souřadnici, tj.

$$\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)T_{lm}(\vartheta)U_m(\varphi). \tag{1}$$

Jak je vidět z předchozího zápisu, tak jednotlivé stacionární stavy jsou „číslovány“ pomocí tří kvantových čísel $n, l, m$. Pro jejich hodnoty platí následující podmínky:

$$n = 1, 2, 3, ... \qquad l = 0, 1, 2, ...n-1 \qquad m = 0, \pm1, \pm2, ... \pm l. \tag{2}$$

### Význam jednotlivých částí vlnové funkce

• *Radiální část* vlnové funkce má tvar

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{nl}\left(\frac{2r}{na}\right) e^{-\frac{r}{na}}, \tag{3}$$

kde $a = 5,3 \cdot 10^{-11}$ m je tzv. Bohrův poloměr a $L_{nl}$ je polynom.[1] Vidíme, že pro velké souřadnice $r$ vlnová funkce exponenciálně klesá.

• Tvar celé úhlové části můžeme často najít pod názvem *kulová funkce*. Jak je naznačeno výše, lze ji napsat jako součin dvou funkcí:

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = T_{lm}(\vartheta)U_m(\varphi) \tag{4}$$

$$T_{lm}(\vartheta) = P_{lm}(\cos\vartheta) \tag{5}$$

$$U_m(\varphi) = e^{im\varphi} = \cos(im\varphi) + i\sin(im\varphi) \tag{6}$$

kde $P_{lm}(x)$ jsou tzv. přidružené Legendrovy polynomy. Jak vidíme, závislost vlnové funkce na $\varphi$ je velmi jednoduchá. Jedná se o jedinou část, která není reálná (přináší komplexnost do vlnové funkce), ale její absolutní hodnota se pro všechny $\varphi$ rovná 1. To znamená, že pokud budeme počítat hustotu pravděpodobnosti výskytu (tj. spočteme $|\psi_{nlm}|^2$) závislost na $\varphi$ vymizí zcela.

V následujících úkolech se seznámíte s tím, jak jednotlivé funkce vypadají a jak tím vytvářejí celkovou vlnovou funkci.

# 4. Legendrovy polynomy

Úkoly v této kapitole budete řešit pomocí aplikace s názvem `Legendre_2D.exe`.

Budeme se zabývat částí $T_{ml}(\vartheta)$ vlnové funkce, která závisí na úhlu $\vartheta$ - její tvar určuje tzv. přidružený Legendrův polynom, do kterého dosadíme $\cos\vartheta$. Přidružený Legendrův polynom je určen dvěma indexy (tzv. stupeň a řád) a tyto indexy odpovídájí kvantovým číslům $l, m$ příslušného stacionárního stavu. V programu se indexy nastavují vlevo nahoře a program nepovolí nastavit nedovolenou kombinaci těchto čísel. Po změně hodnot program překreslí všechny grafy (může to chviličku trvat, protože veškeré funkce se opravdu

[1] Jedná se o tzv. Laguerrův polynom stupně $n+1$ a řádu $2l+1$, což se obvykle zapisuje $L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)$

počítají bod po bodu). Pro nízké hodnoty kvantových čísel se zobrazí i analytický tvar vykreslované funkce („vzoreček“).

Program zobrazuje stejný polynom ve třech dvojicích různých typů grafu. Aby se nám o nich lépe hovořilo, očíslujeme si grafy podle následujícího schématu:

| | | |
|---|---|---|
| 1 | 2 | 3 |
| 4 | 5 | 6 |

4.1.) Pohrajte si s programem, vyzkoušejte různé hodnoty $l, m$. Vytvořte vlastní hypotézy, jak jednotlivé grafy interpretovat, jak spolu souvisí. Všechny své nápady poznamenejte. Prosím nečtěte vysvětlení uvedené dále, ale opravdu se pokuste na to přijít sami.

**Popis jednotlivých grafů**

V následujícím textu jsou popsány jednotlivé grafy, které program zobrazuje. Text si pečlivě přečtěte a promyslete. Zkuste označit jeho části, které jste odhalili sami.

Graf 1 je klasický kartézský graf, ve kterém je zakreslen Legendrův polynom. Všimněte si, že proměnná $\vartheta$ nabývá hodnoty mezi 0 a $\pi$.

V grafu 2 je osa $z$ orientována svisle. Jak už víme, úhel $\vartheta$ je úhel mezi osou $z$ a vybraným směrem (polopřímkou vycházející z počátku). Hodnota polynomu pro daný úhel $\vartheta$ je vyjádřena „intenzitou“ (sytostí, jasností) barvy, jakou je příslušná polopřímka nakreslena. Pokud je hodnota kladná, je funkce vykreslena červeně, záporné hodnoty modře.

Při konstrukci grafu č. 3 (tzv. polární graf) vynášíme hodnoty polynomu opět na příslušné polopřímky vycházející z počátku. Vezmeme polopřímku pro dané $\vartheta$ a na ní vyneseme úsečku, jejíž délka odpovídá funkční hodnotě. Protože je vynášená funkce spojitá, vytvoří koncové body všech úseček pěknou hladkou křivku. Pokud potřebujeme odečíst hodnotu z tohoto grafu, tak postupujeme obráceně. Najdeme polopřímku určenou úhlem $\vartheta$ a změříme vzdálenost počátku souřadnic a průsečíku dané polopřímky s grafem. Změřená vzdálenost odpovídá hodnotě funkce pro celou polopřímku (všechny body na polopřímce mají stejný úhel $\vartheta$, tedy stejnou funkční hodnotu). Barvy zde fungují podobně jako v grafu 2.

Spodní řada grafů (grafy 4, 5, 6) přesně odpovídá té horní pouze je ve všech vykreslena druhá mocnina daného polynomu.

Zaměřme pozornost ještě jednou na grafy 2 a 3. Zkuste se zamyslet nad tím, proč je využita jenom půlka prostoru, který jim je vymezen.

Jejich svislá osa odpovídá reálné ose $z$ a vodorovná ose $x$ nebo $y$. Ale každý úhel $\vartheta$ odpovídá dvěma různým polopřímkám vycházejícím z počátku souřadnic, které jsou vzájemně zrcadlově symetrické vůči ose $z$. Nic nám nebrání v tom, vykreslit náš polynom i pro polopřímky v levé části grafu - ozrcadlením (viz tlačítko `Zrcadlení`). Nezískáme tím sice žádnou novou informaci o daném polynomu, ale výsledný obrázek bude lépe odpovídat „skutečnému prostorovému průběhu“ dané funkce.

Pozor - při zapnutém zrcadlení, nezobrazují grafy 2 a 3 průběh daného polynomu pro $\vartheta$ od 0 do $2\pi$, ale opravdu zrcadlí průběh od 0 do $\pi$ podle osy $z$. Zkuste najít polynom, na kterém to lze rozlišit.

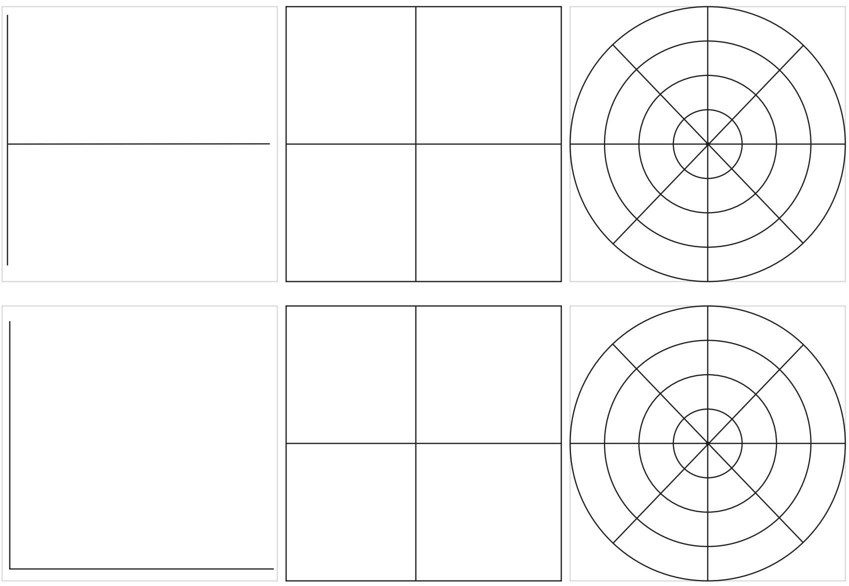
$l =$ $\qquad m =$

4.2.) Ověřte všechny uvedené vlastnosti grafů na zobrazení několika různých polynomů - tj. zobrazte si několik různých polynomů a prozkoumejte jednotlivé grafy, zda opravdu odpovídají tomu, co bylo napsáno výše. Speciálně se zaměřte na to, jak poznat minima a maxima v jednotlivých typech grafů a zda si vzájemně odpovídají.

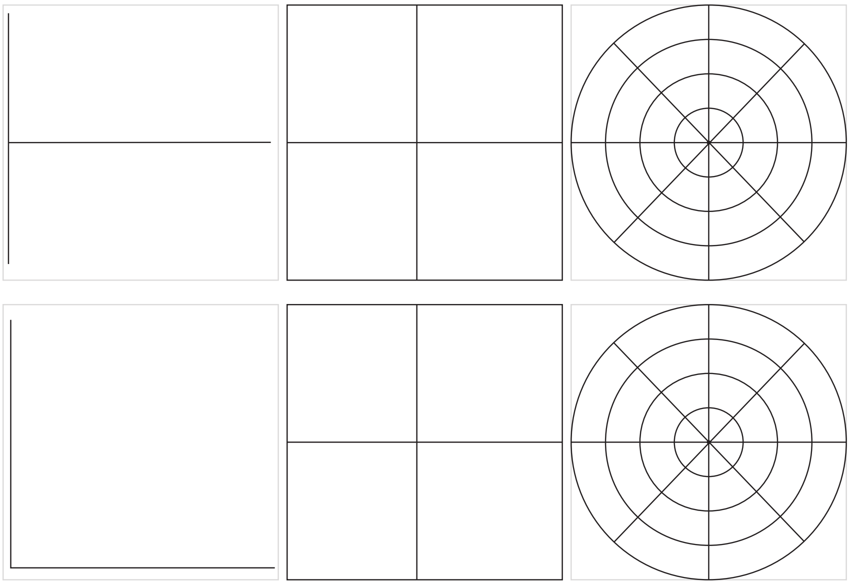
K řešení další úlohy budete potřebovat **tužky dvou barev, ideálně modrou a červenou**. Pokud použijete jiné dvě barvy, poznamenejte, která hraje roli jaké barvy.

V následujícím úkolu si ověříte, že jednotlivým typům grafů opravdu rozumíte. Vpravo nad každým grafem je malé tlačítko, kterým lze vypnout a zapnout jeho zobrazování. Navíc nahoře vpravo jsou tlačítka, kterými lze vypnout či zapnout všechny grafy najednou. Před řešením dalšího úkolu **zapněte zrcadlení a vypněte zobrazení všech grafů**.

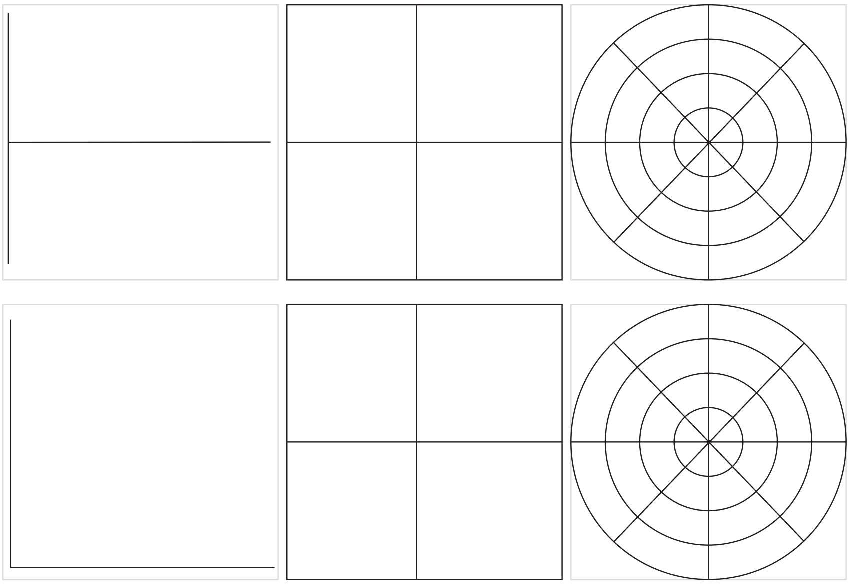
4.3.) a) Nastavte tyto hodnoty kvantových čísel: $l = 4, m = -1$. Potom zapněte pouze graf 1. Načrtněte do následujícího obrázku, jak budou vypadat ostatní grafy. Snažte se zachytit intenzitu barvy např. hustotou šrafování, dejte pozor na správné použití barev. Až budete mít vše zakresleno, zkontrolujte si správnost tím, že opět zapnete všechny grafy.



b) Opět vypněte všechny grafy, nastavte $l = 4, m = 2$. Zapněte tentokrát graf č. 2 a nakreslete ostatní. Po načrtnutí si nezapomeňte své výsledky zkontrolovat.



c) A poslední varianta, vypněte opět všechny grafy, nastavte $l = 3, m = 2$, zapněte graf 3, dokreslete ostatní a zkontrolujte své výsledky.



Pokud jste v tomto úkole udělali více chyb nebo si nejste jistí tím, že podle jednoho typu grafu správně odhadnete tvar jiného typu, vyřešte si ještě několik podobných úloh dle svého výběru. Je důležité si nejenom říci, jak bude funkce vypadat, ale opravdu se pokusit ji zachytit na papír, protože tím jste nuceni přemýšlet o výběru barvy, intenzitě šrafování, velikosti „kopečků“ a lépe odhalíte, jak moc jste se trefili.

4.4.) S grafem 1 se běžně pracuje v hodinách matematiky i fyziky na SŠ, zbylé dva typy se používají velmi zřídka (nejenom na SŠ). Aniž byste si znova četli jejich vysvětlení, zkuste zformulovat vlastními slovy na základě zkušeností získaných v předchozím příkladě, co vyjadřují (např. jak byste vysvětlili někomu, kdo je vidí poprvé, jak jim rozumět).

a) graf 2

a) graf 3

4.5.) Zkuste porovnat výhody a nevýhody jednotlivých typů zobrazení. Napadá vás něco z praktického života, co by se dalo dobře kreslit právě pomocí těch méně běžných grafů?

4.6.) Otázka spíše fyzikální. Proč nás zajímá i druhá mocnina Legendrova polynomu?

# 5. Kulové funkce

V této kapitole se budeme zabývat celou úhlovou částí $Y_{ml}$ vlnové funkce (tzv. kulovými funkcemi). Už víme, že část závislá na $\varphi$ (tj. $U_m(\varphi)$ je poměrně jednoduchá a je to jediná část celé vlnové funkce, která je komplexní.

5.1.) Připomeňte si, jak to dopadne s komplexností a závislostí na obou úhlech, pokud spočítáme $|Y_{ml}(\vartheta, \varphi)|^2$? Odpověď je uvedena opět na konci textu.

Na kulové funkce se budeme dívat jako na funkce všech tří prostorových proměnných $r, \vartheta, \varphi$. Protože tato funkce nezávisí na $r$, má stejnou hodnotu podél každé polopřímky vycházející ze středu.

Pro tuto kapitolu je připravena aplikace `Legendre_3D.exe`, ve kterém se seznámíme i s prostorými možnostmi zobrazení. Je podobný tomu předcházejícímu. Grafy si opět očíslujeme, aby se nám o nich lépe hovořilo.

| | |
|---|---|
| 1 | 2 |
| 3 | 4 |

V celé této kapitole budeme kreslit druhé mocniny Legendrových polynomů. To znamená, že námi vykreslované funkce nezávisejí ani na $\varphi$ a jsou všude kladné.

5.2.) Jaké funkční hodnoty nabývá kulová funkce pro polopřímky, které neleží v rovině obrazovky, resp. papíru? Jaký mají tvar oblasti, na kterých bude mít funkce stejnou hodnotu? Jak lze z 2D grafů z předcházející kapitoly získat 3D grafy? Napište svoje odpovědi a nápady:

**Vysvětlení 3D grafů**

Připomeňme si, že teď vykreslujeme druhé mocniny Legendrových polynomů (resp. kulových funkcí). První dva grafy již znáte z předchozí kapitoly.

Graf 3 je prostorovou analogii grafu 1. Protože teď už ale nemůžeme nakreslit všechny polopřímky vycházející z počátku, protože by se nám vzájemně za sebou schovávaly, je hodnota každé polopřímky znázorněna barvou bodu, ve kterém tato polopřímka protíná kouli.

Graf 4 je zase prostorovou analogii polárního grafu (graf 2). Konstruován je úplně stejně. Na každou polopřímku si vyneseme od počátku úsečku, jejíž délka vyjadřuje hodnotu. Protože je funkce krásně spojitá, vytvoří nám takto získané body krásnou hladkou plochu, která je na tomto grafu znázorněná. Naopak, pokud chceme z tohoto grafu odečíst hodnotu pro nějaké zvolené úhly $\vartheta, \varphi$, najdeme nejprve polopřímku, která odpovídá těmto úhlům, a změříme velikost úsečky mezi počátkem a průsečíkem polopřímky a vykreslené plochy.

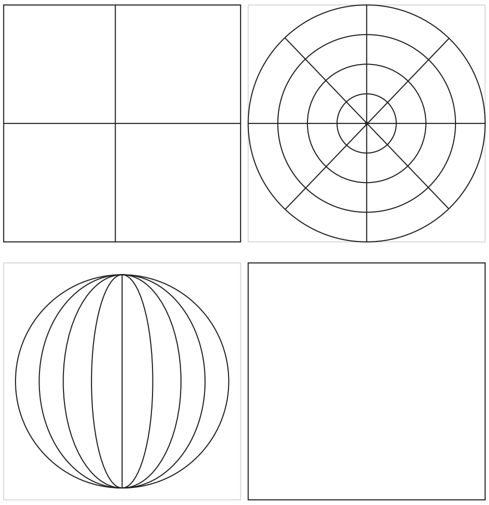
Oběma prostorovými grafy lze pomocí myši otáčet a zvětšovat a zmenšovat je. Pokud se ztratíte v tom, jak máte obrázek momentálně natočen, restartujte program. Vrátí se do původního nastavení, ve kterém je osa $z$ svisle.

5.3.) Pohrejte si s programem, zobrazte si několik funkcí, prozkoumejte správnost uvedeného vysvětlení.

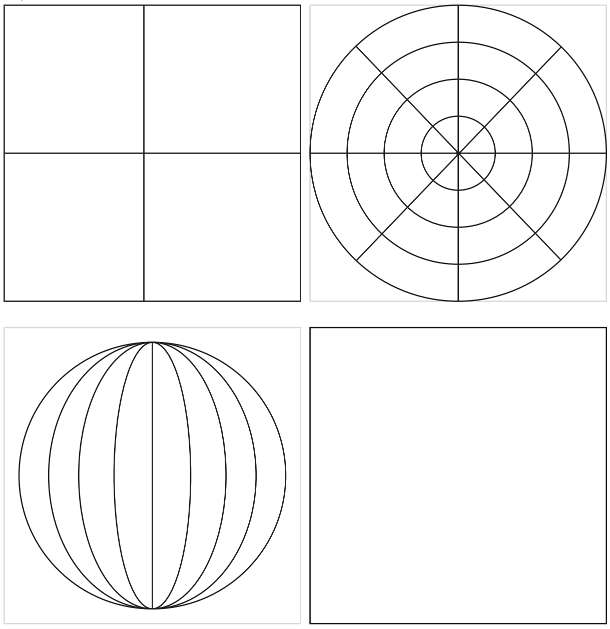
5.4.) Prostorové grafy 3 a 4 vzniknout tak, že plošnými (1 a 2) nějak pohybujeme. Jak? Jak říkáme této symetrii?

5.5.) Tento úkol je podobný jako v předchozí kapitole a měl by vám pomoci si uvědomit, zda uvedeným grafům opravdu rozumíte. **Vypněte zobrazení všech grafů**. Nastavte uvedené hodnoty kvantových čísel, zapněte daný graf, dokreslete zbylé do obrázku a pak si vše zkontrolujte. Je jasné, že kreslení prostorových obrázků je náročné, ale pokuste se na papír zachytit alespoň podstatné rysy dané plochy.

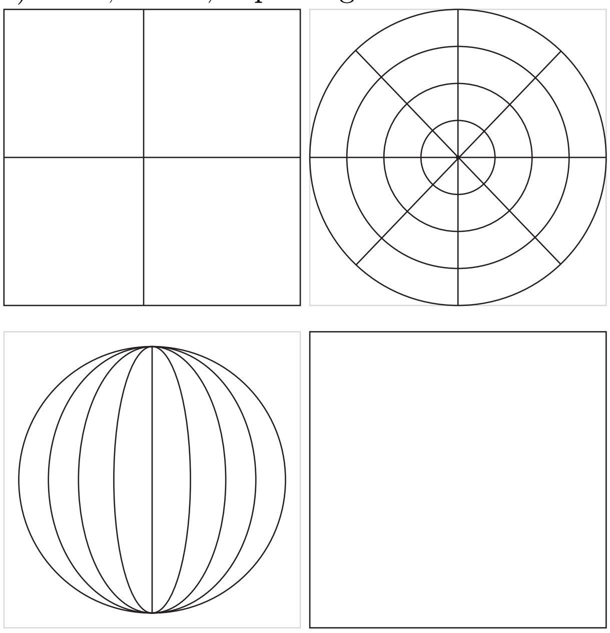
a) $l = 3, m = 2$, zapněte graf 1



b) $l = 4, m = 2$, zapněte graf 3



c) $l = 2, m = 0$, zapněte graf 4



Pokud jste v tomto úkole udělali více chyb nebo si nejste jistí tím, že podle jednoho typu grafu správně odhadnete tvar jiného typu, vyřešte si ještě několik podobných úloh dle svého výběru.

5.6.) Aniž byste si znova četli vysvětlení, zkuste zformulovat vlastními slovy na základě zkušeností z předchozího příkladu, co vyjadřují 3D grafy (např. jak byste popsaly, průběh funkce někomu, kdo takovýto způsob zakreslení vidí poprvé).

a) graf 3

b) graf 4

5.7.) Zkuste porovnat výhody a nevýhody jednotlivých typů zobrazení, plochého a prostorového, pomocí intenzity barvy nebo polárním grafem.

# 6. Radiální část vlnové funkce

V této kapitole se dostáváme k radiální části vlnové funkce. Připomeňme si její tvar:

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{nl}\left(\frac{2r}{na}\right) e^{-\frac{r}{na}} \,, \tag{7}$$

kde $a = 5,3 \cdot 10^{-11}$ m je tzv. Bohrův poloměr a $L_{nl}$ je polynom. Tato část udává, jak se mění vlnová funkce se vzdáleností od počátku $r$.

Vlnová funkce je dána součinem radiální a úhlové části. Hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu je dána druhou mocninou vlnové funkce, resp. přesněji

$$|\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi)|^2 = |R_{nl}(r)Y_{ml}(\vartheta,\varphi)|^2 = R_{nl}^2(r)L_{ml}^2(\vartheta,\varphi)^2 \tag{8}$$

Právě tuto funkci se budeme snažit zobrazovat v této části.

6.1.) Pro tuto kapitolu je připraven program `3D_orbitaly.exe`. Než se pustíme do dalšího výkladu a práce, pusťte si ho a vyzkoušejte, co zobrazuje.

Zavedeme si opět očíslování grafů.

| | | |
|---|---|---|
| 1 | 2 | 3 |
| 4 | | 5 |

Grafy 1 a 2 již znáte z přechozích částí (zobracují $|Y|^2$), graf 4 vlevo dole zobrazuje druhou mocninu radiální části vlnové funkce, tj. $R_{nl}^2$. Grafy 3 a 5 se snaží zachytit celkovou hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu v daném stacionárním stavu.

6.2.) Zkuste přijít na to, co přesně zobrazují grafy 3 a 5 a jak spolu souvisí. Pomoci vám může modrý posuvník vlevo dole. Než budete číst dál, napište své postřehy:

**Vysvětlení grafů**

Jak již bylo napsáno výše grafy 3 a 5 zobrazují hustotu pravděpodobnosti výskytu elektronu pomocí intenzity červené barvy. Graf 3 ukazuje řez libovolnou rovinou, která obsahuje osu $z$ (ta je umístěna svisle). Díky nezávislosti $|\psi_{nlm}|^2$ na $\varphi$ jsou všechny tyto řezy stejné (vzpomeňte si na 2. kapitolu). Prostorovou závislost bychom získali, pokud bychom tento graf roztočili kolem osy $z$.

Poznámka: Hustota pravděpodobnosti je ve většině míst velmi malá, tak malá, že červená je tak málo intenzivní, že téměř nejde odlišit od černé. Graf 3 se tedy zdá skoro celý černý. Tyto méně zřetelné oblasti s nenulovou hustotou pravděpodobnosti si můžete zvýraznit tím, že posunete dolů modrý posuvník na barevné škale vpravo od tohoto grafu. Místa, ve kterých je hustota pravděpodobnosti vyšší než odpovídá aktuální poloze tohoto posuvníku, se vykreslí bíle. Pro hustotu pravděpodobnosti nižší se využije opět celá škála černá-červená, proto se zvýrazní i místa, která byla předtím „příliš málo červená“.

Graf 5 se snaží o prostorové znázornění hustoty pravděpodobnosti. Hustota pravděpodobnosti je zobrazena na povrchu koule se středem v počátku souřadnic. Poloměr koule se nastavuje posuvníkem vlevo dole. O jeho velikosti nás informuje poloha žluté úsečky v grafu 4 a kružnice v grafu 3, ale z důvodu pěkného zobrazení se koule (i když reálně měníme její rozměry) vykresluje stále stejně velká. Koulí lze otáčet a přesvědčit se tak o symetrii hustoty pravděpodobnosti vůči ose $z$.

6.3.) Zkuste si vytvořit nějaký postup, jak z grafů, na kterých je zachycena pouze úhlová (grafy 1 a 2) a pouze radiální část (graf 4), vytvořit graf celkové hustoty pravděpodobnosti (graf 3).

6.4.) Prakticky ověřte své nápady. Pomocí malého tlačítka v pravém horním rohu grafu 3 ho vypněte. Nastavte zadané hodnoty kvantových čísel a pokuste se nakreslit, jak bude graf 3 vypadat. Potom si své výsledky zkontrolujte.
a) $n = 3, l = 0, m = 0$ b) $n = 4, l = 3, m = 1$ c) $n = 4, l = 2, m = 1$

6.5.) Zkuste porovnat obě zobrazení hustoty pravděpodobnosti (graf 3 a 5), jejich názornost či vhodnost.

A teď ještě dvě úložky fyzikální, ve kterých se zaměříme pouze na radiální část:

6.6.) Někdy je hodnota radiální části vlnové funkce pro $r = 0$ nulová, někdy ne. Zobrazte si několik různých vlnových funkcí a najděte jednoduché pravidlo pro kvantová čísla.

6.7.) Opět si zobrazte několik radiálních částí, ale tontokrát se zaměříme na počet nulových bodů. Pozor nebudeme započítávat případnou nulovost pro $r = 0$ (tj. v počátku) a pro $r \to \infty$. Zkuste najít vzoreček, jak z hodnot kvantových čísel určit počet těchto nulových bodů.

**Poznámka o radiální hustotě pravděpodobnosti:**

Možná vás v úloze 6.6. překvapilo, že pro některé stacionární stavy má radiální funkce svoje maximum v počátku soustavy souřadné - tj. že je nejpravděpodobnější najít elektron uprostřed atomu. U úvah tohoto typu - jak je pravděpodobné najít elektron někde - si musíme dát pozor, zda nás zajímá opravdu konkrétní místo, nebo (což je častější) v jaké vzdálenosti od středu atomu elektron najdeme. Pokud nám jde pouze o vzdálenost mluvíme o tzv. **radiální hustotě pravděpodobnosti**. Tu získáme tak, že „vyintegrujeme“ hustotu pravděpodobnosti přes povrch koule (to jsou body, kde má elektron požadovanou vzdálenost). Např. pro $l = 0$ nezávisí vlnová funkce na úhlech a hledaná radiální hustota pravděpodobnosti by byla $\rho(r) = povrch\,koule \cdot |\psi|^2 = 4\pi r^2 R^2$. Vidíme, že člen $r^2$ nám spolehlivě vynuluje $\rho(r)$ pro $r = 0$ a tedy velmi malé vzdálenosti elektronu od jádra nejsou příliš pravděpodobné.

Můžeme se na to podívat ještě jinak. Hustota pravděpodobnosti se vzdáleností klesá, ale povrch koule, na které hledáme elektron naopak roste, takže výsledná radiální hustota závisí na tom, jak dopadne porovnání těchto dvou protichůdných vlivů. Naštěstí exponenciální pokles $R$ je dostatečně rychlý, takže v opravdu velkých vzdálenostech od jádra se elektrony vyskytují také s velmi malou pravděpodobností.

Hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu a tato radiální hustota se velmi často nesprávně zaměňují!

# 7. Orbital

7.1.) Tuto kapitolu začneme úkolem. Zkuste napsat, co je podle vás orbital. Nejde o to dohledat a citovat přesnou definici, ale popsat třeba i velmi mlhavou představu, kterou jste si utvořili na základě „dávno zapomenutého středoškolského vzdělání“ a „ještě nenaučené přednášky z kvantovky a atomovky“.

Pojem atomový orbital se v učebnicích používá ve dvou různých významech. Někdy se pod pojmem orbital myslí přímo hustota pravděpodobnosti nalezení částice v daném stacionárním stavu, resp. vlnová funkce tohoto stavu.

Častěji se ale pod orbitalem myslí „prostor“, kde je pravděpodobnost nalezení elektronu „velká“. Buď se uvede, že má být větší než nějaká konkrétní hodnota nebo je tato oblast vymezena požadavkem, že celková pravděpodobnost nalezení elektronu v této oblasti má být vyšší než např. 95%. Tvar orbitalu si můžete zobrazit v programu `3D_orbitaly.exe` pomocí grafu 3. Posunováním posuvníku vpravo od grafu nastavujete limit pro velikost hustoty pravděpodobnosti, místa, kde je tato hodnota vyšší se vykreslí bíle a tvoří orbital (v tomto významu). Prostorový obrázek bychom, jak již dobře víme, získali roztočením tohoto řezu kolem osy $z$. Takže je vidět, že se často jedná o několik nesouvislých oblastí.

Na tomto místě bych vás chtěla důrazně varovat před obrázky v některých učebnicích či jiných textech. Často se za tvar orbitalu vydává polární graf kulové funkce, což není správně! Také jsou často příslušné obrázky kresleny jen „od ruky“, čímž se sice zachová poloha minim a maxim, ale již ne přesný tvar těchto funkcí.

Na závěr ještě jednu poznámku. Celou dobu jsme pracovali se stacionárními stavy, které byly popsány kvantovými čísly $n, l$ a $m$. Tyto stavy tvoří bázi prostoru všech stavů, ve kterých se elektron může v atomu vodíku nacházet. Jejich lineární kombinace vytvářejí další přípustné stavy. Protože energie závisí pouze na kvantovém čísle $n$, je většina hladin degenerovaná. Z toho ale plyne, že existují kombinace „našich“ stacionárních stavů, které mají také ostrou hodnotu energie (a jsou také stacionární). To znamená, že lze vytvořit i jiné „stejně dobré“ báze, což se také dělá. Hlavně chemici při vysvětlování podstaty chemické vazby často pracují s jiným systémem stacionárních funkcí. Proto při prohlížení obrázků v učebnicích kvantové fyziky pro chemiky je třeba jisté opatrnosti.

# 8. Výsledky některých úkolů

2.2.) a) $r \in (0, \infty)$ b) $\vartheta \in (0, \pi)$ c) $\varphi \in (0, 2\pi)$

2.3.) a) $\vartheta = \pi/2$, $\varphi = 0$ nebo $\varphi = \pi$ b) $\vartheta = \pi/2$, $\varphi = \pi/2$ nebo $\varphi = 3\pi/2$ c) $\vartheta = 0$ nebo $\vartheta = \pi$

2.4.) a) $\vartheta = \pi/2$ b) $\vartheta$ libovolná, $\varphi = 0$ nebo $\pi$ c) $\vartheta$ libovolná, $\varphi = \varphi_0 \in (0, \pi)$ nebo $\varphi = \varphi_0 + \pi$

2.5.) a) povrch koule b) povrch kužele s vrcholem v počátku c) polorovina, osa $z$ tvoří její hranici

2.6.) a) polopřímky vycházející z počátku b) polokružnice se středem v počátku a krajními body na ose $z$; kružnice v rovinách kolmých na $z$ se středem na ose $z$; povrch koule

5.1.) Výsledek bude reálný a zcela zmizí závislost na $\varphi$, tj. $|Y_{ml}(\vartheta,\varphi)|^2 = L_{ml}^2(\cos\vartheta)$.

5.2.) povrch kužele se středem v počátku

5.4.) roztočit kolem osy $z$, rotační nebo válcová symetrie

6.6.) pro $l = 0$

6.7.) $n - l - 1$

# 9. Závěrečný dotazníček

Na závěr si dovolím ještě dotazníček, abych věděla, jak se vám s tímto materiálem pracovalo:

Na škále od 2 (perfektní) do -2 (horor) ohodnoťte
a) srozumitelnost úkolů a výkladu
b) přínosnost
c) zábavnost a zajímavost práce s programy

Prosím okomentujte tento materiál i slovně.

Napadá Vás ještě nějaké další zobrazení hustoty pravděpodobnosti nebo jednotlivých částí vlnové funkce, které by vám pomohlo vytvořit si představu, jak tyto funkce vypadají?

Napadá vás ještě nějaký jiný typ úkolu, který by mohl sloužit k lepšímu pochopení nebo ověření správné interpretace jednotlivých typů grafu?

Jakékoli další poznámky:

Na závěr bych vám moc ráda poděkovala za prostudování těchto pracovních listů, splnění a vyplnění úkolů.

Zdeňka Broklová