

# Pojďme si hrát s orbitaly

Pracovní listy připravené pro dílnu semináře Heuréky v Náchodě 22. - 24. 10. 2006

Materiály použité na této dílně, příslušné programy a zkušenosti z jejich používání naleznete na adrese: <http://kdf.mff.cuni.cz/broklova/orbitals/?lang=CZ>.

## 1. Úvodní povídání

### Co je to **orbital**?

- rozložení hustoty pravděpodobnosti nalezení elektronu v atomu v tzv. vlastních (=stacionárních) **stavech**  
= kvadrát vlnové funkce
- nebo
- místa, kde je tato hustota „velká“
  - tvár tohoto místa

2

### Co je to **stav**?

- u QM částic nemůžeme říci: „v tomto čase je částice na tomto místě“, ale pro jejich popis používáme tzv. vlnovou funkci
- z vlnové funkce lze určit, jaká je pravděpodobnost, že částice bude v daném čase v daném místě  
= hustota pravděpodobnosti =  $|vlnová\ fce|^2$
- částice se nachází v daném stavu = částice je popsána danou vlnovou funkcí**

3

### Co jsou **stacionární** stavy?

- stacionární = vlastní
- když budu měřit energii částice, tak mohu naměřit různé hodnoty i pro částice ve stejném počátečním stavu
- jestliže ale vždy naměřím stejnou energii, pak je částice v tzv. stacionárním stavu  
= **stav s danou hodnotou energie**
- existují jen pro „některé“ energie – energetické spektrum, dovolené/zakázané energie

4

### Jsou i **nestacionární** stavy?

- ano, jsou to všechny ostatní stavy
- vznikají kombinacemi stacionárních stavů
- když budu měřit energii, naměřím sice také jednu z povolených hodnot energie, ale nemohu říci předem kterou (i když znám vlnovou funkci)

5

### Jak najdu stacionární vlnové funkce a povolené energie?

- řeším Schrödingerovu rovnici
  - diferenciální rovnice = rovnice pro hledání funkcí
  - energie vystupuje jako parametr
- škrtnu fyzikálně nesmyslná řešení (např. nekonečná v nekonečnu) => zbydou mi jen některé hodnoty energie (povolené) a některá řešení (stacionární)
  - Příčinou kvantování energie není Schr. rovnice, ale vlastnosti, které po vlnové funkci vyžaduje fyzika.

6

### Jak vypadá **vlnová funkce**?

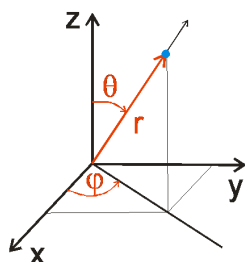
- obecně je to složitá funkce prostorových souřadnic a času
- čas nás dnes nezajímá (tj.  $t=0$  nebo  $t=\text{konst.}$ )
- typické označení:  $\psi = \psi(x, y, z)$
- protože elektrostatické pole v atomu vodíku je „kulaté“, budou pro nás výhodné sférické souřadnice

$$\psi = \psi(x, y, z) = \psi(r, \theta, \varphi)$$

7

## Definice sférických souřadnic

- $x = r \sin \theta \cos \varphi$
- $y = r \sin \theta \sin \varphi$
- $z = r \cos \theta$
- $\theta$  ... „zeměpisná šířka“
- $\varphi$  ... „zeměpisná délka“



8

## Číslování řešení

- pomocí trojice čísel  $n, l, m$   
= tzv. kvantová čísla
- možné hodnoty:  $n = 1, 2, 3, \dots$   
 $l = 0, 1, \dots, n-1$   
 $m = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, l$
- každé trojici čísel odpovídá jedno řešení = jedna vlnová funkce = jeden stav

9

## Separace souřadnic

- řeším tedy Schr. rovnici pro atom vodíku
- řešení jde (kupodivu) napsat ve tvaru:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) P_{lm}(\theta) U_m(\varphi)$$

- $R_{nl}(r) = \text{polynom}(r) \cdot e^{-r/(na)}$  radiální část
- $P_{lm}(\theta) = \text{polynom}(\cos \theta)$  úhlová č.  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  (tzv. kulová funkce)
- $U_m(\varphi) = e^{i \cdot m \cdot \varphi}$  (jediná komplexní část)

10

## Zrychlený postup

- Známe elektrostatische pole v atomu vodíku
- Dosadím pole do Schr. rovnice a najdu fyzikálně vhodná řešení (vlnové funkce)
- Tato řešení šikovně „očísľují“ trojici čísel
- Vlnová funkce = součin tří funkcí
- (Vlnová funkce)<sup>2</sup> = hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu = **orbital**

**A to budeme kreslit!**

11

## Konkrétní tvary částí vlnové funkce:

Radiální část  $R_{n,l}(\rho)$ ,  $\rho = \frac{r}{a}$ , kde  $a = 5,3 \cdot 10^{-11}$  m je tzv. Bohrovův poloměr

$$R_{1,0}(\rho) = 2e^{-\rho}$$

$$R_{2,0}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{2,1}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \rho e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{3,0}(\rho) = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - \frac{2}{3}\rho + \frac{2}{27}\rho^2\right) e^{-\frac{\rho}{3}}$$

$$R_{3,1}(\rho) = \frac{8}{27\sqrt{6}} \rho \left(1 - \frac{1}{6}\rho\right) e^{-\frac{\rho}{3}}$$

$$R_{3,2}(\rho) = \frac{4}{81\sqrt{30}} \rho^2 e^{-\frac{\rho}{3}}$$

$$R_{4,0}(\rho) = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{3}{4}\rho + \frac{1}{8}\rho^2 - \frac{1}{192}\rho^3\right) e^{-\frac{\rho}{4}}$$

$$R_{4,1}(\rho) = \frac{1}{16} \sqrt{\frac{5}{3}} \rho \left(1 - \frac{1}{4}\rho + \frac{1}{80}\rho^2\right) e^{-\frac{\rho}{4}}$$

$$R_{4,2}(\rho) = \frac{1}{64\sqrt{5}} \rho^2 \left(1 - \frac{1}{12}\rho\right) e^{-\frac{\rho}{4}}$$

$$R_{4,3}(\rho) = \frac{1}{768\sqrt{35}} \rho^3 e^{-\frac{\rho}{4}}$$

Legendrové polynomy s argumentem  $\cos \theta$ , tj.

$$P_{l,m}(\cos \theta)$$

$$P_{0,0}(\theta) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$

$$P_{1,-1}(\theta) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta$$

$$P_{1,0}(\theta) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$$

$$P_{1,1}(\theta) = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta$$

$$P_{2,-2}(\theta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta$$

$$P_{2,-1}(\theta) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta$$

$$P_{2,0}(\theta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$P_{2,1}(\theta) = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta$$

$$P_{2,2}(\theta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta$$

$$P_{3,-3}(\theta) = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \theta$$

$$P_{3,-2}(\theta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta$$

$$P_{3,-1}(\theta) = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$$

$$P_{3,0}(\theta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$$

$$P_{3,1}(\theta) = -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$$

$$P_{3,2}(\theta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta$$

$$P_{3,3}(\theta) = -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \theta$$

## 2. Než začneme řešit

K vypracování následujících úkolů budete potřebovat speciálně připravené aplikace. Tyto aplikace jsou již nainstalovány, najdete je ve **složce Orbitaly na ploše** počítače.

V tomto pracovním sešitě jsou uvedeny zadání úkolů a výklad malých kousků teorie. Prosím, opravdu **zapisujte a kreslete** veškeré výsledky, hypotézy, nápady, **nebojte se dělat chyby**, používat „jednoduchá slova“, snažit se zformulovat i nepřesné představy. Doporučuji Vám **pracovat postupně** a nečíst si dopředu vysvětlení. To je odzkoušený způsob, jak se toho naučit nejlépe.

Protože času na řešení přímo v dílně není mnoho, nestihnete nejspíše vyřešit všechny úlohy. Pokud chcete postupovat rychleji, vynechte řešení úloh označených • (jedná se o úlohy podobné předcházejícím, rozšiřující nebo obtížnější).

## 3. Sférické souřadnice

Pro řešení stacionární Schrödingerovy rovnice atomu vodíku je díky „kulatosti“ elektrostatického pole jádra velmi výhodné použít **sférické souřadnice**. Věnujme teď pár minut tomu, že si připomeneme jejich vlastnosti.

definice: 
$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \varphi \\y &= r \sin \theta \sin \varphi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}$$

3.1.) Aníž byste nahlíželi na předchozí stránky, nakreslete obrázek, který odpovídá naší definici sférických souřadnic a vyznačte do něj souřadnice  $x, y, z, r, \theta, \varphi$ . Slovně popište význam sférických souřadnic  $r, \theta, \varphi$  a určete, jakých hodnot nabývají.

3.2.) Při řešení a pro kontrolu úloh v této kapitole můžete použít aplikaci s názvem `3D_poloprimka.exe`. Vyzkoušejte si a popište, co tento program zobrazuje.

Následující úlohy můžete řešit úvahou a uvedený program použít pro kontrolu. Také je možné úlohy řešit přímo pomocí programu. Zkusmo nastavte pohyblivou polopřímku do požadované pozice a odečtěte hodnoty úhlů. Řešení některých úloh jsou uvedena v závěru.

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

• 3.4.) Podobně jako v předchozím úkolu popište následující roviny:

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

3.5.) Jaký geometrický útvar tvoří všechny body, které

- mají stejnou danou souřadnici  $r$ , ale liší se ve  $\theta, \varphi$ ?
- mají stejnou danou souřadnici  $\theta$ ?
- mají stejnou danou souřadnici  $\varphi$ ?

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

b) Řešte předchozí úlohu i pro funkci nezávislou na  $\theta, \varphi$ , resp. nezávislou na obou úhlech.

## 4. Legendrové polynomy

V této kapitole se budeme zabývat částí vlnové funkce, která závisí na úhlu  $\theta$ . (poznámka: Příslušným polynomům se říká Legendrovy.)

4.1.) Připomeňte si, jak vypadá a jakými kvantovými čísly je očíslována tato část vlnové funkce.

Úkoly v této kapitole budete řešit pomocí aplikace s názvem `Legendre_2D.exe`. V programu se kvantová čísla nastavují vlevo nahoře a program nepovolí nastavit nedovolenou kombinaci těchto čísel. Po změně hodnot program překreslí všechny grafy (*může to chvíličku trvat*, protože veškeré funkce se opravdu počítají bod po bodu). Pro nízké hodnoty kvantových čísel se zobrazí i analytický tvar vykreslované funkce („vzoreček“).

1	2	3
4	5	6

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

4.2.) Pohrajte si s programem, vyzkoušejte různé hodnoty  $l, m$ . Vytvořte vlastní hypotézy, jak jednotlivé grafy interpretovat, jak spolu souvisí. Pro nízká kvantová čísla zkontrolujte správnost grafu dle analytického tvaru funkce. Všechny své nápady poznamenejte. Prosím nečtěte si vysvětlení, které následuje, ale opravdu se pokuste to nejprve zformulovat sami.

### Popis jednotlivých grafů

Následující text si pečlivě přečtěte a promyslete. **Označte** jeho části, které jste odhalili sami.

Graf 1 je klasický kartézský graf, ve kterém je zakreslena příslušná funkce. Všimněte si, že proměnná  $\theta$  opravdu nabývá hodnoty mezi 0 a  $\pi$ .

V grafu 2 je osa  $z$  svisle. Úhel  $\theta$  měříme (neorientovaně) mezi osou  $z$  a vybraným směrem (polopřímku vycházející z počátku). Hodnota polynomu pro daný úhel  $\theta$  je vyjádřena „intenzitou“ (sytostí, jasností) barvy, jakou je příslušná polopřímka nakreslena. Kladné hodnoty jsou vykresleny červeně, záporné hodnoty modře.

Při konstrukci grafu č. 3 (tzv. polární graf) vynášíme hodnoty polynomu opět na příslušné polopřímky vycházející z počátku. Na polopřímku pro dané  $\theta$  vyneseme od počátku souřadného systému úsečku, jejíž délka odpovídá funkční hodnotě pro tento úhel. Protože je vynášena funkce spojitá, vytvoří koncové body všech úseček pěknou hladkou křivku. Barvy zde fungují podobně jako v grafu 2. **Všechny body na polopřímce mají stejný úhel  $\theta$ , tedy stejnou funkční hodnotu!**

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

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

### Vysvětlení

Úhel  $\theta$  nabývá hodnot od 0 do  $\pi$ , což přesně odpovídá polovině „kruhu“. Svislá osa těchto grafů odpovídá ose  $z$  prostorového souřadného systému a vodorovná např. ose  $x$  (nebo  $y$ ). Ale pro každý úhel  $\theta$  najdeme v této rovině dvě různé polopřímky vycházející z počátku souřadnic. Tyto polopřímky jsou zrcadlově symetrické vůči ose  $z$ . Nic nám nebrání v tom,

vykreslit naši funkci i na polopřímky v levé části grafu (stiskněte tlačítko Zrcadlení). Nezáskáme tím sice žádnou novou informaci o daném polynomu, ale výsledný obrázek bude lépe odpovídat „skutečnému prostorovému průběhu“ dané funkce.

- 4.4.) Pozor - při zapnutém zrcadlení, nezobrazují grafy 2 a 3 průběh daného polynomu pro  $\theta$  od 0 do  $2\pi$ , jak by se mohlo mylně zdát, ale opravdu zrcadlí průběh od 0 do  $\pi$  podle osy  $z$ . Zkuste najít polynom, na kterém to lze rozlišit.

$l =$              $m =$

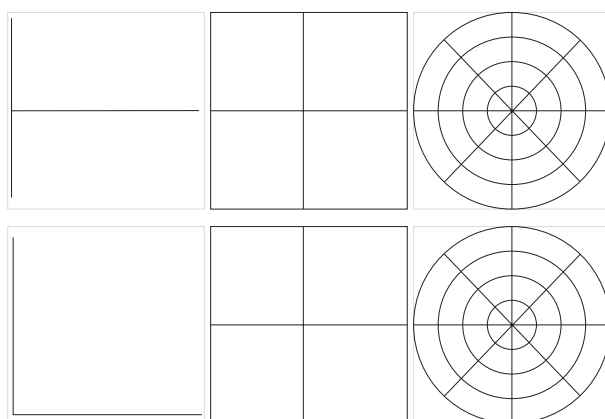
4.5.) Ověřte všechny uvedené vlastnosti grafů na zobrazení několika různých polynomů - tj. zobrazte si několik různých polynomů a prozkoumejte jednotlivé grafy, zda opravdu odpovídají tomu, co bylo napsáno výše. Speciálně se zaměřte na to, jak poznat minima a maxima v jednotlivých typech grafů a zda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

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

4.6.) a) Nastavte tyto hodnoty kvantových čísel:  $l = 4, m = -1$ . Potom zapněte jen graf 1. Načrtněte, jak budou vypadat ostatní grafy. Pro kreslení je vhodné si nejprve načrtnout „mřížku“ uvedenou dále. Snažte se zachytit intenzitu barvy (např. hustotou šrafování), dejte pozor na správné použití barev. Až budete mít vše zakresleno, zkontrolujte si správnost tím, že 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, dokeslete ostatní a zkontrolujte své výsledky.



Pokud jste v tomto úkolu udělali více chyb nebo si nejste jistí tím, že podle jednoho typu grafu správně vytvoříte jiný, 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.

- 4.7.) S grafem 1 se běžně pracuje v hodinách matematiky i fyziky na SŠ, zbylé dva typy se používají velmi zřídka (nejenom na SŠ). Aníž 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 hlavně na co si dát pozor.

4.8.) Zkuste porovnat výhody a nevýhody jednotlivých typů zobrazení (grafy 1, 2, 3). Napadá vás něco z praktického života, co by se dalo dobře kreslit pomocí méně běžných grafů?

4.9.) Otázka spíše fyzikální. Proč nás zajímá 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. Na  $|Y_{ml}|^2$  se budeme dívat jako na funkci všech tří prostorových proměnných  $r, \theta, \varphi$ .

5.1.) Naše funkce nezávisí na  $r$ . Jaký tvar mají místa, kde má určitě stejnou funkční hodnotu.

5.2.) Připomeňte si, jak to dopadne s komplexností a závislostí na obou úhlech, pokud spočítáme  $|Y_{ml}(\theta, \varphi)|^2$ ?

• 5.3.) Na základě řešení předchozí úlohy zkuste vymyslet, jaké hodnoty má druhá mocnina kulové funkce na polopřímkách, které neleží v rovině obrazovky, resp. papíru? Jaký mají tvar oblasti, ve kterých bude mít funkce stejnou hodnotu? Jak lze z 2D grafů z předcházející kapitoly získat 3D grafy?

1	2
3	4

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 očíslováme, aby se nám o nich lépe hovořilo.

5.4.) Pohrajte si s programem, vyzkoušejte různé hodnoty  $l, m$ . Vytvořte vlastní hypotézy, jak spolu souvisí plošné a prostorové grafy. Prosím nečtěte si vysvětlení, které následuje, ale opravdu se pokuste to nejprve zformulovat sami.

### Vysvětlení 3D grafů

Připomeňme si, že v celé této kapitole vykreslujeme druhé mocniny kulových funkcí (resp. Legendrových polynomů) a naše funkce závisí jen na  $\theta$ . První dva grafy již známe z předchozí kapitoly.

Graf 3 je prostorovou analogií grafu 1. Protože teď už ale nemůžeme nakreslit všechny polopřímky vycházející z počátku, protože by se nám vzájemně za sebou schovávaly, ořízli jsme celý prostor a ponechali jen kouli kolem počátku souřadnic, takže vidíme jen barvy průsečíků polopřímek a této koule.

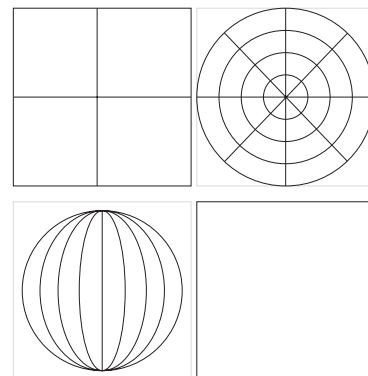
Graf 4 je prostorovou analogií polárního grafu (graf 2). Konstruován je úplně stejně. Na každou polopřímku si vyneseme od počátku úsečku, jejíž délka vyjadřuje hodnotu. Protože je funkce krásně spojitá, vytvoří nám takto získané body krásnou hladkou plochu, která je na tomto grafu znázorněná.

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

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

5.6.) Tento úkol je podobný jako v předchozí kapitole. **Vypněte zobrazení všech grafů.** Nastavte uvedené hodnoty kvantových čísel, zapněte daný graf, nakreslete zbylé a pak si vše zkontrolujte. Je jasné, že kreslení prostorových obrázků je náročné, ale pokuste se na papír zachytit alespoň podstatné rysy dané plochy nebo použijte plastelínu :-).

- 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 vytvoříte ostatní, vyřešte si ještě několik podobných úloh dle svého výběru.

• 5.7.) 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).

5.8.) Popište výhody a nevýhody jednotlivých typů zobrazení (rovinného a prostorového, intenzitou barvy a polárním grafem) a porovnejte je.

## 6. Radiální část vlnové funkce

V této kapitole se dostáváme k radiální části vlnové funkce. 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

$$|\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 = |R_{nl}(r)Y_{ml}(\theta, \varphi)|^2 = R_{nl}^2(r)P_{ml}^2(\theta)$$

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. Grafy 1 a 2 již znáte z přechodných částí (zobrazují  $|Y|^2$ ), 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  $|\psi_{nlm}|^2$  nalezení elektronu v daném stacionárním stavu.

1	2	3
4	5	

6.2.) Zkuste přijít na to, jak spolu souvisí grafy 3 a 5 a jak. 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. Prostorovou závislost získáme tak, že tento graf roztočíme kolem osy  $z$  (tj. kolem svislé osy).

Poznámka: Hustota pravděpodobnosti je ve většině míst velmi malá, tak malá, že tmavě červená 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 škále 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: Hustota pravděpodobnosti je zobrazena na povrchu koule se středem v počátku souřadnic. Poloměr koule se nastavuje posuvníkem vlevo dole. O velikosti poloměru nás informuje poloha žluté úsečky v grafu 4 a kružnice v grafu 3. Z důvodu pěkného zobrazení se koule (i když reálně měníme její rozměry) vykresluje stále stejně velká. Kouli 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). Prakticky ověřte své nápady. Pomocí malého tlačítka v pravém horním rohu **grafu 3 ho vypněte**. Nastavte následující 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)  $n = 4, l = 2, m = 1$

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

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

- 6.5.) Někdy je hodnota radiální části vlnové funkce pro  $r = 0$  nulová, někdy ne. Zobrazte si několik různých vlnových funkcí a najděte jednoduché pravidlo, kdy to nastane.

- 6.6.) Opět si zobrazte několik radiálních částí, ale tentokrát se zaměříme na počet nulových bodů. Pozor nebudeme započítávat případnou nulovost pro  $r = 0$  (tj. v počátku) a pro  $r \rightarrow \infty$ . 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) nás zajímá 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  $\rho(r) = \text{povrch koule} \cdot |\psi|^2 = 4\pi r^2 R^2$ . 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 ve velkých vzdálenostech 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 „silný“, takže v opravdu velkých vzdálenostech od jádra se elektrony vyskytují s velmi malou pravděpodobností.

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

6.7.) Pomocí malého tlačítka nad grafem 4 si můžete zobrazit i radiální hustotu pravděpodobnosti (vykreslí se zeleně, dokonce ve dvou variantách - se společnou škálou nebo s rozdílnými škálami tak, aby obě funkce měly podobně vysoké „kopečky“). Pozorujte vliv členu  $r^2$ .

## 7. Orbital

7.1.) Pokuste se popsat, co je podle vás orbital. Nejde o to dohledat a citovat přesnou definici, ale popsat třeba i velmi mlhavou představu.

Pojem atomový orbital se používá ve dvou různých významech. Někdy se pod pojmem orbital myslí přímo hustota pravděpodobnosti nalezení částice v daném stacionárním 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 hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu 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.

## 8. A co na to chemici?

Celou dobu jsme pracovali s určitou skupinou stacionárních stavů Tyto stavy tvoří bázi prostoru všech stavů, ve kterých se elektron může v atomu vodíku nacházet. Tj. jejich (lineární) kombinace vytvářejí další přípustné stavy. Protože energie závisí pouze na kvantovém čísle  $n$ , existují i takové kombinace „našich“ stacionárních stavů, které mají dobře definovanou 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 chemických učebnicích je třeba jisté opatrnosti.

## 9. Výsledky některých úkolů

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

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

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

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

3.6.) 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.) polopřímky vycházející z počátku souřadného systému, pokud si uvědomíme i nezávislost funkce na  $\varphi$ , tak povrch kužele se středem v počátku

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

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

6.6.) pro  $l = 0$

6.7.)  $n - l - 1$