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

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

Právě tuto funkci se budeme snažit zobrazovat v této části.

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.

<table>
<tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr>
<tr><td colspan="2">4</td><td>5</td></tr>
</table>

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^2_{nl}. Grafy 3 a 5 se snaží zachytit celkovou hustotu pravděpodobnosti nalezení elektronu v daném stacionárním stavu.

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 φ 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.

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).

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) $n = 4, l = 2, m = 1$

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.) 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.

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!