

Atomové jednotky

Vypracoval Radovan Čech

Klasický a kvantový svět

Kvantové zákony ovládají titěrné mikroobjekty, jako jsou atomy a molekuly. V každodenním životě však kvantové efekty zpravidla nepozorujeme. Kde je rozhraní obou světů a jak je můžeme rozpoznat a charakterizovat?

Rozmazané rozmezí klasického a kvantového světa

To jest:

makroskopické se nekryje s klasickým,
mikroskopické se nekryje s kvantovým

Planckova konstanta

$$\hbar \approx 1,05 \times 10^{-34} \text{ Js}$$
$$1,05457168(18) \times 10^{-34} \text{ Js}$$

- hodně malé číslo
- rozměr energie \times čas=akce=délka \times hybnost=moment hybnosti
- Planck původně zavedl $h = 2\pi\hbar$
- dnes již známo s velkou přesností

Více rolí Planckovy konstanty

1. V základních rovnicích $[x, p] = i\hbar$ $i\hbar\partial_t\psi = H\psi$
2. Jako převodní koeficient $E = \hbar\omega = h\nu$
3. Jako charakteristická mezní veličina $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$

Bohrova teorie vodíku

- Dvě podmínky pro Bohrov poloměr a Hartreeho energii

odstř. síla = dostř. síla

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e'^2}{r^2}$$

Klasická podmínka

kvantování momentu hybnosti

$$m_e r v = k \cdot \hbar, \quad k = 1, 2, \dots$$

Kvantová podmínka

- Výsledek

$$r_k = a_0 \cdot k^2, \quad E_k = -\frac{1}{2} E_0 \cdot k^{-2}$$

Bohrov poloměr
0,053 nm

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e'^2},$$

$$E_0 = \frac{m_e e'^4}{\hbar^2}$$

Hartreeho energie
27,2 eV

2x ionizační energie vodíku

Děsivé hodnoty a šikovní jednotky

Uvažme, že

$$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

Je rozumné si zavést jednotky atomistice přiměřené.

Např. (v rámci zákonné soustavy SI)

nm, eV, fs

1 eV je energie, kterou elementární náboj získá při

průchodu potenciálním rozdílem 1 V,

$$1 \text{ eV} = 1.60 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Pak vyjde neobyčejně šikovně

$$\hbar = 0.66 \text{ eVfs}$$

$$m_e = 5.7 \text{ eVfs}^2 \text{nm}^{-2}$$

Ještě lepší je přejít k **přirozeným jednotkám**

$$m_e = e = \hbar = 1$$

Tři klíčové teorie (pro atomární systémy)

Nepůjdeme-li na sub-atomární úroveň, jsou pro popis fyzikálního světa klíčové tři teorie a ty mají jako svůj symbol tři universální konstanty

G

Klasická mechanika a teorie gravitace
Gravitační zákon

$$F = -\frac{Gm_1m_2}{r_{12}^2}$$

C

Teorie elektromagnetického pole
Maxwellovy rovnice, vlnová rovnice

$$\partial_{tt}\mathbf{E} - c^2\Delta\mathbf{E} = \mathbf{0}$$

\hbar

Kvantová teorie
Komutační relace, Schrödingerova rovnice

$$[x, p] = i\hbar$$
$$i\hbar\partial_t\psi = H\psi$$

Další universální konstanty

Jiný typ universálních konstant – charakteristiky částic

		elektron	proton
vlastnosti částic	náboje	elektrické $-e$	$+e$
		gravitační m_e	m_p
	hmotnosti	m_e	m_p

Atomové přirozené jednotky

Přirozené soustavy jednotek závisejí na výběru fundamentálních konstant

jednotky	G	c	\hbar	e'^2	m_e	m_p	hodí se v
Planckovy	•	•	•				kvantové gravitaci
relativistické		•	•		(•	•)	kvantové elektrodynamice
atomové			•	•	•		atomové fyzice

Atomové jednotky

- Inspirace od *Bohra*(1913) Rozměrová úvaha → **relevantní veličiny**
- Dvě podmínky pro Bohrovův poloměr a Hartreeho energii
(rozměrové kombinace ... kinetická energie a Coulomb. potenciál. energie)

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}, \quad E_0 = \frac{e'^2}{a_0}$$

- Výsledek

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e'^2}, \quad E_0 = \frac{m_e e'^4}{\hbar^2}$$

v plné shodě s
Bohrovou teorií

Atomové přirozené jednotky

Jsou nejvhodnější pro atomární
soustavy