



## **Průlomové experimenty a modely atomové a kvantové fyziky**

Seminární práce k předmětu  
F7050 Kvantová elektronika

# Průlomové experimenty a modely atomové a kvantové fyziky

Již před dvěma a půl tisíci lety si staří Řekové kladli otázku, zda a případně jak souvisí vlastnosti objektů s jejich eventuální vnitřní strukturou. Tehdejší učenci se časem rozdělili na dva tábory. Jedni zastávali názor, že jakákoli látka má spojitou strukturu a může se tedy dělit bez omezení (*Nauka o živlech*). Druzí, jejichž hlavním představitelem byl Démokritos (460-360 př.K.), prosazovali diskrétní strukturu hmoty (*Atomistická koncepce*).

Od té doby uplynula spousta let, aniž by byla některá z teorií experimentálně potvrzena. Mezitím se fyzika stala samostatnou vědou, koncem 19. století byly už vybudovány jednotlivé disciplíny, zejména mechanika, optika, elektrodynamika a termodynamika.

Konečné rozhodnutí v otázce struktury hmoty přinesla až důkladná teoretická a experimentální analýza Brownova pohybu (pozorován 1827 anglickým botanikem Robertem Brownem), kterou v roce 1908 provedl Jean Baptista Perrin (podrobněji v [1]).

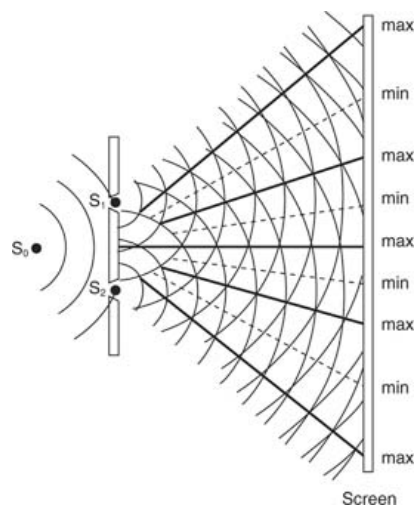
Dalo by se říci, že celé 19. století a první polovina století 20. byla ve znamení rodící se atomové a kvantové fyziky. Pojdme si nyní ve zkratce připomenout experimenty a modely, které nejvíce ovlivnily vývoj fyziky v tomto období.

## 1. Světlo ... elektromagnetické vlnění?

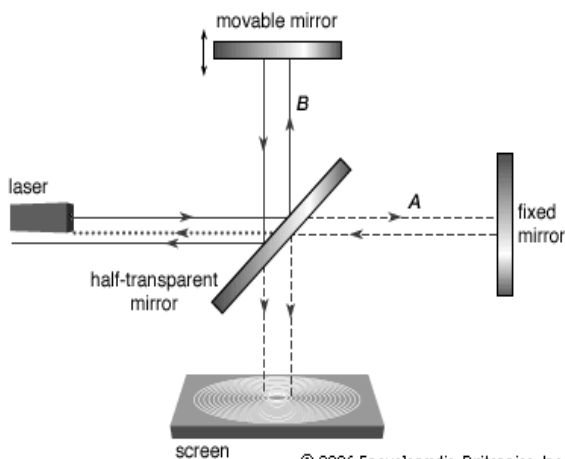
Zatímco atomisté považovali světlo za další druh látky složené z částic, renesanční myslitelé si světlo představují spíše jako šíření rozruchu v plynném či tekutém prostředí. Leonardo da Vinci přirovnává světlo k šíření vln na vodní hladině, Huygens si myslí, že jde o podélné vlny (nebyly známy pojmy vlnová délka, barva světla, interference...). Všichni se ale přiklánějí k vlnové teorii světla.

Důkazem vlnového charakteru světla se stal v roce 1803 Youngův interferenční experiment (obrázek 1). Interference byla Youngem důkladně popsána včetně stanovení vlnové délky světla. Světlo bylo ale stále považováno za podélné vlnění nějakého prostředí – éteru, jeho fyzikální podstata nebyla známá.

Jak to s šířením světla skutečně je, předpověděl Maxwell ve svých vlnových rovnicích pro šíření  $\vec{E}$  a  $\vec{B}$  (1873). Došel k závěru, že se změny energie elektromagnetického pole šíří prostorem rychlostí  $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  a že k šíření elektromagnetických vln není potřeba prostředí. Existenci éteru vyvrátil i experiment, který provedli v roce 1887 Michelson a Morley (obrázek 2).



Obr. 1: Youngův experiment



Obr. 2: Michelsonův interferometr

Dlouhou dobu se potom neobjevovaly experimenty proti vlnové teorii, problémy nastaly až při zkoumání emise a absorpce záření.

Ve fyzice byly tedy známy dvě formy hmoty: částice (lokalizované v čase a prostoru) řídicí se Newtonovými zákony a záření (nelokalizované v čase a prostoru a díky tomu schopné interference a difrakce) řídicí se Maxwellovými rovnicemi.

Teprve když se zájem fyziků posouvá na částice stále menší a záření o stále menší intenzitě, objevují se v teorii klasické fyziky trhliny.

## 2. Tepelné záření absolutně černého tělesa.

Historicky prvním významným selháním klasické fyziky byla neschopnost objasnit naměřené křivky frekvenční závislosti hustoty energie  $\rho(\nu, T)$  rovnovážného elektromagnetického záření v dutině absolutně černého tělesa. Klasická teorie vycházející z Maxwellových rovnic a kanonické rozdělovací funkce dávala pro spektrální hustotu energie výraz

$$\rho_{RJ}(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot kT ,$$

(Reyleigh-Jeansův zákon), kde  $k$  je Boltzmanova konstanta a  $T$  je teplota. První část vztahu (zlomek) odpovídá počtu vln v dutině, druhá část energii  $e$  na jednu vlnu o frekvenci  $\nu$ . Tento vztah však diverguje pro vysoké frekvence (tzv. ultrafialová katastrofa). O něco blíže správnému vztahu se dostal W. Wien, když hledal energii na jednu vlnu jako funkci  $\nu$  a  $T$ . Odvodil vztah

$$\rho_W(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot a \nu e^{-b\frac{\nu}{T}} ,$$

(Wienův zákon) kde  $a, b$  byly zatím neznámé konstanty. Správnou funkci

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot h\nu \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} ,$$

kde  $h$  je Planckova konstanta ( $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  Js), popisující naměřené křivky, odvodil v roce 1900 M. Planck. Předpokládal totiž (navzdory všem dosavadním zkušenostem), že k emisi a absorpci záření dochází jen po kvantech  $E_n = n h \nu, n = 0, 1, 2, \dots$ .

Planckovu hypotézu zobecnil A. Einstein při svém vysvětlení fotoelektrického jevu.

## 3. Fotoelektrický jev.

Fotoelektrický jev byl pozorován už v roce 1839 A. E. Becquerelem. Podrobně se ale fotoefektem jako vedlejším jevem při experimentálním důkazu vlnového charakteru elektromagnetického záření zabýval až H. R. Hertz v roce 1887. Pozoroval, že při ozáření izolovaného vodiče světlem (nebo UV) došlo k jeho nabití na kladný náboj. Jev byl dále zkoumán dalšími fyziky na různých kovech, s různými frekvencemi a s různými intenzitami dopadajícího světla. Bylo zjištěno, že:

- pro každý materiál existuje minimální frekvence, při které se fotoefekt objeví – tzv. červený práh
- fotoproud teče okamžitě po ozáření
- fotoproud roste s rostoucí intenzitou záření a s rostoucí frekvencí.

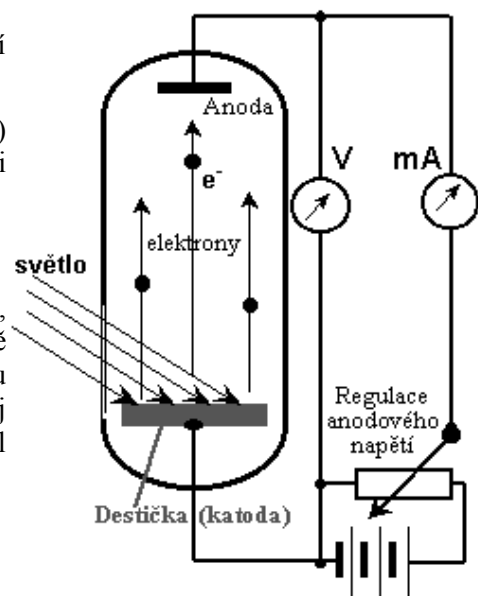
Jev byl vysvětlen A. Einsteinem po objevu elektronu (viz níže) jako absorpce kvanta elektromagnetického záření o energii  $E = h\nu$  (1905). Einsteinova rovnice pro fotoefekt

$$T = h\nu - A ,$$

kde  $T$  je kinetická energie elektronu,  $h$  Planckova konstanta,  $\nu$  frekvence a  $A$  výstupní práce kovu, byla experimentálně potvrzena Millikanem, který ozařoval elektrodu světlem s různou frekvencí a měřil brzdné napětí  $U$  (poté, co si sám změřil náboj elektronu  $e$ ). Podle experimentálně zjištěné závislosti sestavil rovnici

$$T = U e = k_1 \nu e - k_2 e ,$$

která byla po porovnání koeficientů shodná s rovnicí Einsteinovou.



Obr. 3: Fotoelektrický jev

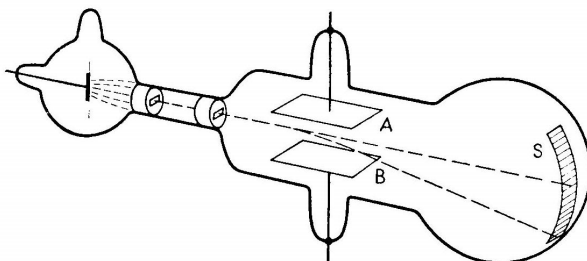
#### 4. Objev elektronu.

J. J. Thomson navázal na experimenty svých předchůdců (Plücker, Herz, Lenard) se zářením rozžhavené katody ve vyčerpané sklešené trubici. Zdokonalil měřicí aparaturu a zjistil, že při dostatečném vyčerpání trubice se dá katodové záření vychýlit elektrickým polem. Podle změny výchylky na opačnou stranu při změně polarizace pole usoudil, že jde o svazek záporně nabitých částic s velkou rychlostí. Podle ostrosti stopy mínil, že jde o homogenní svazek (stejně částice a stejná rychlost). Zjistil také, že na částice nemá vliv gravitační pole, ale naopak v magnetickém poli se svazek vychyluje.

Na základě experimentů se mu podařilo určit poměr náboje  $q$  a hmotnosti  $m$  neznámých částic:

$$\frac{q}{m} = \frac{\Delta E}{B^2 l (L + \frac{l}{2})} ,$$

kde  $E, B$  jsou charakteristiky pole,  $l$  je délka úseku s působícím polem,  $L$  je délka úseku od konce vychylujícího pole ke stínítku. Tyto výsledky byly publikovány v roce 1897.



Obr. 4: Thomsonův experiment

Tento poměr měl hodnotu  $-10^{11} \text{ C}\cdot\text{kg}^{-1}$ , což byla hodnota 1000x větší než největší dosud známý měrný náboj vodíkového iontu. Nabízely se dvě možné varianty: buď jde o částice běžné velikosti s 1000x větším nábojem, nebo o částice 1000x menší nesoucí běžný náboj. Fyzici se brzy shodli na druhé možnosti, což potvrdil i další Thomsonův experiment – měření náboje částice ve Wilsonově mlžné komoře.

#### 5. Nezdár klasické fyziky

Krátce po objevo elektronu se začalo diskutovat o vnitřním uspořádání atomu. Objevily se různé modely (Perrin – planetární, Lenard – dynamidový, Nagaoka – saturnský), z nichž se zdál být nejrozumnější Thomsonův pudinkový model atomu. I při důležitosti celého problému trvalo 13 let, než bylo provedeno jeho experimentální ověření, které nakonec vedlo k objevení skutečné atomové struktury.

Experiment, v němž byl měřen rozptyl  $\alpha$  částic na tenké zlaté fólii, provedli fyzici Geiger a Marsden v roce 1911 na návrh E. Rutherforda. Rutherford odvodil, že počet částic  $\alpha$   $N(\theta)$  dopadajících na jednotkovou plochu stínítka pod úhlem  $\theta$ , je

$$N(\theta) = \frac{N_i n t Z^2 e^4}{(8\pi \epsilon_0)^2 r^2 T^2 \sin^4(\frac{1}{2}\theta)} ,$$

kde  $N_i$  je počet částic dopadajících na stínítko,  $n$  počet atomů v jednotkovém objemu,  $t$  tloušťka folie,  $Z$  atomové číslo,  $e$  jednotkový náboj,  $r$  vzdálenost stínítka od folie,  $T$  kinetická energie  $\alpha$  částic a  $\theta$  úhel rozptylu.

Úvahami klasické fyziky se vědcům podařilo odhadnout velikost atomového jádra i poloměr atomů, ovšem Coulombův zákon ani Newtonovy zákony nestačily na vysvětlení pohybů elektronů v atomovém obalu. Podle klasické fyziky by totiž atomy nemohly být stabilní, protože nabitě částice pohybující se po zakřivené dráze emitují energii na úkor své energie mechanické (elektron by se přibližoval k jádru a stačilo by pouhých  $10^{-16}$  sekund, aby se zhroutil vodíkový atom). Tento nezdár klasické fyziky objasnil v roce 1913 N. Bohr.

#### 6. Atomová spektra.

K nejvýznamnějším úspěchům Bohrovy teorie patří její schopnost vysvětlit původ spektrálních čar. Proto zde uvádím zmínku o objevech týkajících se atomových spekter.

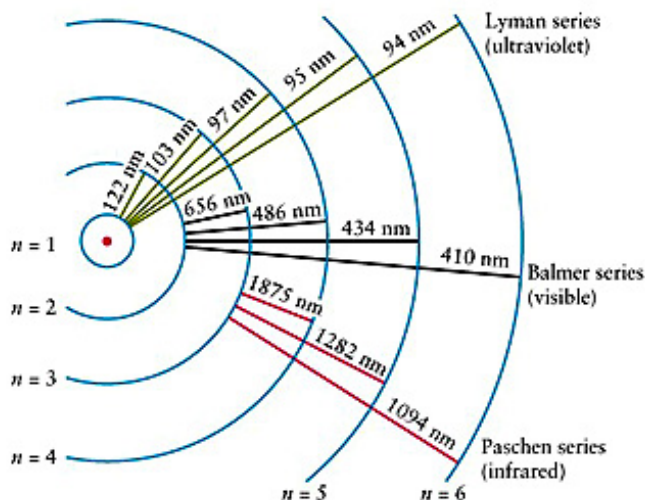
Na sklonku 19. století bylo zjištěno, že vlnové délky přítomné v atomových spektrech se řadí do jistých skupin, zvaných série. Vlnové délky lze najít podle jednoduchého empirického vzorce. První taková série

byla objevena J. J. Balmerem v roce 1885 při studiu viditelné části spektra atomu vodíku. Balmerův vzorec (zobecněný J. Rydbergem) pro vlnové délky této série je

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, 5, \dots,$$

kde  $R$  je Rydbergova konstanta (má hodnotu  $R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} = 1,097 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$ ).

Později byly objeveny další série v ultrafialové (Lyman) a infračervené (Paschen, Brackett, Pfund) části spektra. Vztahy pro výpočet vlnových délek v jednotlivých sériích se liší pouze číslem ve jmenovateli prvního zlomku v závorce (Lyman - 1, Balmer - 2, Paschen - 3, ...) a čísly  $n$  (Lyman  $n = 2, 3, 4, \dots$ , Balmer  $n = 3, 4, 5, \dots$ , Paschen  $n = 4, 5, 6, \dots$ ).



Obr. 5: První tři spektrální série atomu vodíku

### 7. Bohrov model atomu.

Empirické formule popisující vlnové délky spektrálních čar vodíku byly teoreticky odvozeny N. Bohrem až téměř 30 let po jejich prvním sepsání (Balmer 1885). Aby to ale Bohr dokázal, musel postulovat, že:

- mikročástice se pohybují po vybraných diskretních trajektoriích, jejichž kanonicky sdružené proměnné  $x$ ,  $p$  (zobecněná souřadnice, zobecněný impuls) splňují kvantovací podmínku

$$\oint p \, dx = h n, n = 0, 1, 2, \dots$$

(v případě harm. oscilátoru vede tato podmínka k Planckovu předpisu  $E_n = n \hbar \nu$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ )

- při pohybu po těchto trajektoriích částice nezáří a její diskretní energie  $E_n$  určují možné vyzářené frekvence vztahem

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

Použijeme-li jinou terminologii, můžeme Bohrovy postuláty napsat takto:

- atom se může nacházet po delší dobu jen v tzv. stacionárních stavech se zcela určitými energiemi (čímž je zaručena jeho stabilita)
- při přechodu atomu z jednoho stacionárního stavu do druhého dojde k emisi resp. absorpci jednoho světelného kvanta

$$\varepsilon = h \nu = |E_i - E_f|$$

Na základě těchto postulátů byl odvozen poloměr kruhové dráhy elektronu

$$r_n = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2} n^2 = a_0 n^2,$$

kde  $a_0$  je poloměr první vnitřní dráhy vodíkového atomu, tzv. Bohrovův poloměr (jeho hodnota je 0,53 Å), dále byly odvozeny energetické hladiny atomu

$$E_n = \frac{-m e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2}, n = 1, 2, 3, \dots,$$

a také zobecněný vztah pro vlnové délky spektra atomu vodíku

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{m e^4}{8 h^3 c \epsilon_0^2} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right).$$

V případě, že  $n_i > n_f$ , jde o emisní spektrum atomu vodíku a výsledek je shodný s empirickými vztahy z odstavce 6. V případě, že  $n_i < n_f$ , jde o absorpční spektrum atomu vodíku.

Přestože tato „stará kvantová teorie“ slavila velký úspěch při vysvětlení zákonitostí vodíkového spektra, už její zobecnění na druhý nejjednodušší atom, helium, působilo značné obtíže. Bylo zřejmé, že k vytvoření konzistentní teorie popisující fyziku mikročástic bude třeba zásadnějších změn fyzikální teorie, než pouhédoplňující hypotézy. Bohrovův model atomu obsahoval vážné nesrovnalosti a byl posléze nahrazen přesnějším modelem kvantověmechanickým. Přesto poskytuje cenný přechod od klasické k abstraktnější kvantové teorii atomu.

### 8. Francův-Hertzův experiment.

Počínaje rokem 1914 provedli J. Franck a G. Hertz řadu pokusů, které potvrdily existenci energetických hladin atomů. S použitím aparatury na obrázku X bombardovali páry různých prvků elektrony s danou energií. Mezi mřížkou a sběrnou destičkou se udržuje malý potenciálový rozdíl, takže k proudu, jenž prochází galvanometrem, přispívají jen elektrony s energií vyšší než jisté minimum. Se zvyšováním urychlovacího potenciálu  $V$  dopadá na destičku stále více elektronů. Po dosažení určité kritické energie elektronů však proud z destičky náhle klesá. Tento jev se vysvětluje tím, že elektron během srážky s jedním z atomů ztratí částečně nebo úplně svou kinetickou energii excitací atomu. Tato srážka je nepružná na rozdíl od pružné srážky, při které se energie zachovává. Zvyšuje-li se potom urychlovací potenciál dále, proud opět roste, dokud elektron nemá dostatek kinetické energie, kterou by mohl předat atomu a tím ho excitovat.

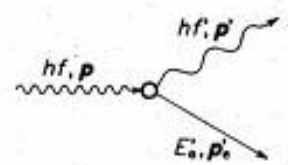
Tento experiment byl potvrzením Bohrovovy teorie.

### 9. Comptonův rozptyl.

V roce 1923 pozoroval Compton při pokusech s rozptylem RTG záření na uhlíkovém vzorku zajímavý jev. Kromě původní vlnové délky detekoval v rozptýleném záření ještě vlnovou délku větší. Zjistil, že rozdíl vlnových délek  $\Delta\lambda$ :

- závisí na úhlu rozptylu  $\varphi$  ( $\Delta\lambda \sim [1 - \cos \varphi]$ )
- nezávisí na původní vlnové délce  $\lambda$  ani na materiálu vzorku
- relativní intenzita  $\frac{I(\lambda + \Delta\lambda)}{I(\lambda)}$  klesá s rostoucím protonovým číslem

Z atomů materiálu.



Obr. 6:

Na základě těchto skutečností určil tzv. Comptonovu vlnovou délku  $\lambda_c = 2,4262 \cdot 10^{-12}$  m jako konstantu úměrnosti ve vztahu pro  $\Delta\lambda$  jako funkce úhlu  $\varphi$ .

Jev byl vysvětlen interakcí fotonů záření s elektrony ve vzorku a popsán pomocí zákona zachování energie a zákona zachování hybnosti soustavy foton-elektron. Rovnice pro posun frekvencí je

$$\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{h}{m_0 c^2} (1 - \cos \varphi)$$

Výsledkem zkoumání byl důležitý poznatek: interaguje-li elektromagnetické pole s látkou, dochází vždy

k výměně energie a hybnosti po kvantech o velikosti  $E = h\nu$ ,  $p = \frac{h\nu}{c}$ .

### 10. Zrození moderní kvantové teorie.

Ke vzniku moderní kvantové teorie došlo dvěma v podstatě nezávislými cestami.

De Broglie vyšel z předpokladu, že vlnově korpuskulární dualismus (demonstrováný fotoefektem a Comptonovým jevem) není pouze vlastností elektromagnetického záření, ale je obecnou vlastností hmoty. Proto předpokládal, že pohyb volné mikročástice o energii  $E$  a impulsu  $p$  je třeba popsat vlnou o frekvenci  $\nu$  a vlnovém vektoru  $k = 2\pi/\lambda$  pomocí vztahů

$$E = h\nu, \vec{p} = h\vec{k} .$$

Abychom zdůraznili převratnost této hypotézy připomeňme, že v té době neexistovaly žádné experimentální důkazy o vlnových vlastnostech mikročástic a k experimentálnímu ověření těchto vztahů difrakcí elektronů na krystalové mříži došlo až o tři roky později (G. P. Thomson, 1927). De Broglieho hypotézu zobecnil E. Schrödinger předpokladem, že rovněž pohyb mikročástic v silovém poli je třeba popsat vlnou (nemonochromatickou), a našel diferenciální rovnici, kterou tato vlna splňuje

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} ,$$

kde  $\hat{H}$  je lineární operátor zobecněné energie (Hamiltonův operátor).

Heisenberg, Jordan a Born vyšli z úplně jiného předpokladu, a sice, že nová teorie musí zcela opustit pojem trajektorie, který v mikrosvětě není experimentálně ověřen. Ve dvou fundamentálních pracích v roce 1925 postulovali nutnost změnit spojitou souřadnici a impuls klasické mechaniky v nekomutující matici  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$  splňující fundamentální relaci kvantové mechaniky

$$\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar \hat{I} .$$

Z algebry matic  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$  pak odvodili druhý Bohrovův postulát a Planckovo kvantování energií oscilátoru. Když o rok později našel Pauli stejnou metodou kvantování energií atomu vodíku, většina fyziků uznala správnost nové teorie.

Během několika dalších let byly základy teorie nerelativistického pohybu mikročástic položeny: byla nalezena správná interpretace vlnové funkce (Born 1926), dokázána ekvivalence maticové a vlnové mechaniky (Schrödinger, 1926), rozkvantováno elektromagnetické pole (Dirac, 1927) a nalezena obecná formulace kvantové teorie, nezávislá na reprezentaci (Dirac, 1930).

Těmito objevy samozřejmě vývoj kvantové fyziky nekončí. Další osudy této oblasti fyziky jsou ale obsahem seminární práce *Fyzikální popis interakce elektromagnetického záření s volným atomem* (vypracována Martinem Hasoňem).

### Literatura:

- [1] Lacina, Aleš: *Atom – od hypotézy k jistotě*, článek ke 170. výročí objevu Brownova pohybu
- [2] Klíma, Jan, Velický, Bedřich: *Kvantová mechanika I.*, Matematicko-fyzikální fakulta KU, Praha 1985
- [3] Beiser, Arthur: *Úvod do moderní fyziky*, Academia, Praha 1978