

Rozborem získaných výsledků dospěl Rutherford v r.1911 k závěru, že k objasnění naměřených úhlových závislostí je třeba, aby celý kladný náboj (a tedy i podstatná část hmoty) atomu byl soustředěn v malé části prostoru - jádro atomu - s lineárním rozměrem řádově 10^{-12} cm. Aby rozměr atomu zůstal asi 10^{-8} cm (vyžadoval to mechanismus vzniku spekter, kinetická teorie plynů a další) , musely se v tomto prostoru nacházet elektrony. Jestliže neměly být přitaženy k jádru, musely kolem něho obíhat tak, aby přitažlivá síla kladně nabitého jádra byla kompenzována odstředivou silou. Tak vznikl Rutherfordův planetární model atomu: kolem jádra s nábojem $+Ze$ (Z je atomové číslo prvku) obíhá Z elektronů s nábojem $-e$.⁺)

Tento model však nastolil mnoho nových otázek, na něž klasická fyzika nemohla dát odpověď. Základním problémem byla samotná existence takového atomu. Podle Maxwellovy elektrodynamiky musí náboj pohybující se zrychleně (elektrony v Rutherfordově atomu mají dostředivé zrychlení) vyzařovat elektromagnetické vlnění. Elektron obíhající kolem jádra by tedy měl vyzařovat na úkor své energie, což by vedlo k postupnému zmenšování poloměru dráhy (pohyb po spirále) a konečně pádu na jádro; to vše by se mělo odehrát asi za 10^{-9} s a elektron by přitom vyzařoval spojité spektrum. Velikou záhadou byla dále stabilita atomů, projevující se neměnností spekter. Vždyť podle Newtonovy mechaniky byly možné elektronové orbity s libovolnými poloměry (a tedy i dobami oběhu). Frekvence emitovaného světla je však určována oběžnou frekvencí; proč tedy např. všechny vodíkové atomy mají absolutně stejné spektrum ? Proč není spektrum nijak ovlivňováno srážkami atomů k nimž musí např. v plynu ve výbojové trubici nutně docházet; při srážce dvou atomů by přece mělo dojít ke změně drah elektronů. Nebo: jak vůbec vznikají serie spektrálních čar ? A další otázky a co otázka, to záhada.

2. Stará kvantová teorie

Názvem stará kvantová teorie se dnes rozumí kvantová teorie rozpracovávaná zhruba v letech 1913-1924 řadou fyziků (Bohr, Sommerfeld, Wilson a další) na základě, který v r.1913 položil mladý dánský fyzik Niels Bohr. Dále si stručně všimneme jen základních Bohrových idejí. Získáme tak nejen historickou informaci, ale jednoduše a názorně zavedeme takové fundamentální veličiny jako je ionizační energie atomu vodíku, a Bohrův poloměr. Navíc, i když Bohrův model vybudovaný na představě

⁺) Pro úplnost nutno dodat, že podobný model (ovšem bez uvedeného experimentálního podkladu) navrhl r.1903 japonský fyzik H.Nagaoka. Pro zjevný rozpor s klasickou elektrodynamikou však nebyl přijímán.

klasických trajektorií je nekompstibilní s novou kvantovou teorií, přece řada intuitivních představ, s nimiž pracuje, je ve shodě se závěry kvantové mechaniky.

2.1) Bohrovy postuláty

V r.1913 uveřejnil N. Bohr serii tří prací v nichž se pokusil o spojení Planckovy a Einsteinovy kvantové hypotézy s Rutherfordovým modelem atomu; jeho cílem bylo objasnit především stabilitu atomu a vznik čárových spekter. Uvědomoval si přitom jasně, že nahromaděný experimentální materiál zjevně svědčí proti extrapolaci klasické mechaniky a elektrodynamiky do atomových dimensí, v nichž nikdy předtím nebyly experimentálně ověřovány.

Bohrovy předpoklady a závěry lze shrnout takto:

- (i) Elektron v atomu se může nacházet jen na kruhových orbitách, jejichž poloměr R vyhovuje podmínce

$$mvR = n \frac{h}{2\pi} \quad (= n\hbar) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (9)$$

kde m je hmotnost elektronu a v je jeho rychlost.

Na těchto stacionárních drahách elektron nevyzařuje elektromagnetické vlnění.

- (ii) Atom emituje nebo absorbuje elektromagnetické záření pouze při přechodu elektronu z jednoho stacionárního stavu do druhého. Při přechodu ze stavu s energií E_i do stavu s energií E_f se emituje (je-li $E_i > E_f$) nebo absorbuje ($E_f > E_i$) foton s energií $h\nu$ (monochromatické vlnění s frekvencí ν), ve shodě s Planckovou hypotézou, takže

$$h\nu = E_i - E_f \quad (10)$$

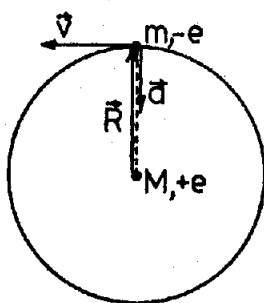
Podmínka (9) vyjadřuje kvantování momentu hybnosti elektronu $\vec{L} = m\vec{v} \times \vec{R}$; kvantování energie elektronu je jejím důsledkem.

2.2) Atom vodíku v Bohrově teorii

Atom vodíku je podle Rutherforda a Bohra tvořen jádrem s hmotností M a nábojem $+e$, kolem něhož obíhá elektron s hmotností m a nábojem $-e$ (obr.6). Protože $M \approx 2000m$, můžeme s dobrou aproximací považovat jádro za nehybné. Velikost dostředivého zrychlení elektronu, který se pohybuje rovnoměrně rychlostí v po kruhové orbitě s poloměrem R , je

$$a = v^2 / R \quad (11)$$

Mezi jádrem a elektronem působí podle Coulombova zákona přitažlivá síla velikosti



Obr. 6.

$$F = \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{R^2} \quad (12)$$

Podle 2. Newtonova zákona $F=ma$, takže dvojnásobek kinetické energie $2T$ je

$$mv^2 = \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 R} \quad (13)$$

Protože potenciální energie elektronu na orbitě je

$$V = - \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{R}, \quad (14)$$

je celková energie $E = T + V$ rovna

$$E = - \frac{1}{2} \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 R} \quad (15)$$

Z (13) a kvantové podmínky (9) (velikost momentu hybnosti $\vec{L} = m\vec{v} \times \vec{R}$ je $L=mvR$ neboť $\vec{v} \perp \vec{R}$) dostaneme poloměry stacionárních orbit

$$R_n = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} n^2 \quad (n=1,2,\dots) \quad (16)$$

Dosazením do (15) získáme celkovou energii v n-tém stacionárním stavu

$$E_n = - \frac{1}{2} \frac{m e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = - \frac{1}{2} \frac{e^2}{(4 \pi \epsilon_0) R_n} \quad (n=1,2,\dots) \quad (17)$$

Základní stav (s nejnižší energií) atomu vodíku odpovídá kvantovému číslu $n = 1$; poloměr příslušné orbity R_1 je tzv. Bohrův poloměr

$$a_0 = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (18)$$

a energie elektronu na této orbitě je

$$E_1 = - \frac{1}{2} \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 a_0} = - 13,606 \text{ eV} \quad (19)$$

Hodnota $I_1 = -E_1 = 13,606 \text{ eV}$ je známá ionizační energie (ionizační potenciál) pro vodíkový atom, tj. energie potřebná k odtržení elektronu

od jádra (převedení ze stavu s $n=1$ do stavu s $n \rightarrow \infty$).

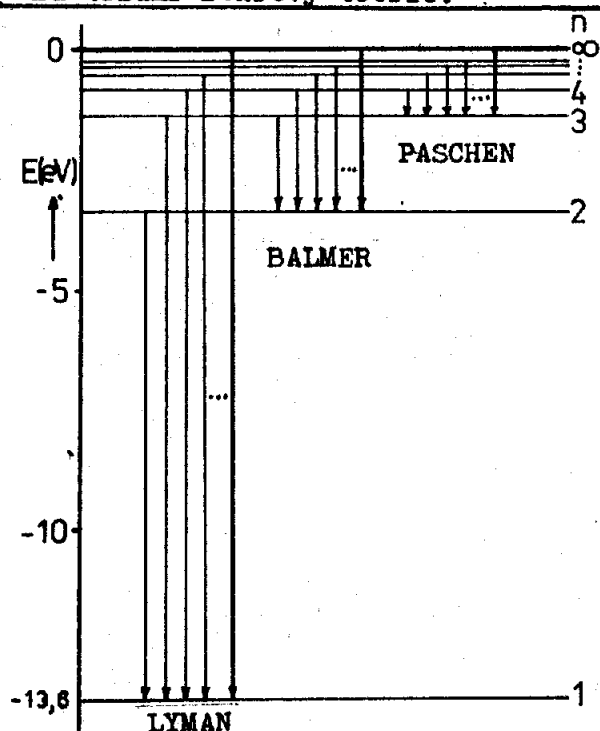
Frekvence ω_{nm} světla emitovaného při přechodu elektronu z hladiny E_n na E_m ($n > m$) (obr.7) je podle (10)

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{m e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (20)$$

Dělením $2\pi c$ ($\sigma = \omega / 2\pi c$) dostaneme vlnočty σ_{mn} a porovnáním s (8) výraz pro Rydbergovu konstantu

$$R_{\infty} = \frac{m e^4}{4\pi (4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3 c} \quad (21)$$

Odvození zobecněného Balmerova vztahu (8) a velice dobrá shoda Rydbergovy konstanty vypočtené podle (21) s hodnotou naměřenou, znamenaly vskutku triumf Bohrově teorie.



Obr. 7

Přechody vedoucí ke spektrálním seriím ve spektru vodíku.

Přechody v opačném směru odpovídají absorpčním čarům.

2.3) Princip korespondence

Princip korespondence byl explicitně zformulován N.Bohrem až v roce 1923, i když implicitně je obsažen již v jeho dřívějších pracích. Smyslem tohoto principu bylo vyjasnit, do jaké míry pojmy a výsledky klasické mechaniky mohou být užitečné při tvorbě a interpretaci kvantové teorie.

Klasická mechanika správně objasňuje široké spektrum fyzikálních jevů v makrosvětě a v některých případech i v mikrosvětě (např. pohyb nabitých částic ve statických elektrických a magnetických polích, tepelný pohyb atomů a molekul v plynech atd.); hlavní potíž, s níž se nemohla v oblasti mikrosvěta vypořádat, spočívala v existenci nespojitých (kvantových) změn některých veličin. Můžeme proto požadovat, aby v případech kdy kvantové skoky jsou malé (a to nastane pro velká kvantová čísla jak je vidět např. ze změn ΔE pro $n \rightarrow \infty$ v (17)), se výsledky kvantové a klasické teorie shodovaly (korespondovaly).

Ukažme si aplikaci tohoto principu na výrazu (17) pro energii elektronu v atomu vodíku. Změna velkého kvantového čísla n o jednotku vede k malé změně E . Aproximujeme-li tuto změnu diferenciálem, je

$$\Delta E = \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^3} \Delta n$$

Frekvence světla emitovaného při přechodech mezi hladinami s vysokými kvantovými čísly tedy je

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 (\hbar n)^3} \Delta n$$

Protože $\hbar n$ je (viz (9)) moment hybnosti $m\Omega R^2$, kde Ω je kruhová frekvence ($\Omega = v/R$) elektronu na orbitě, platí

$$\omega = \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m^3 \Omega^3 R^6} \Delta n$$

Po dosazení za $m^3 \Omega^3 R^6$ z (13) obdržíme

$$\omega = \Omega \cdot \Delta n$$

Pro $\Delta n = 1$ je tedy frekvence emitovaného světla ω shodná s klasickým výsledkem, který je roven právě Ω . Pro $\Delta n = 2, 3, \dots$ dostáváme vyšší harmonické této základní frekvence.

Princip korespondence má zásadní význam: jestliže totiž kvantová mechanika aspiruje na úplný popis jevů, potom musí být schopna popsat všechny fyzikální jevy, včetně těch, které byly objasněny již klasickou fyzikou. Klíčové postavení měl tento princip především v počátcích kvantové mechaniky, kdy působil jako prubířský kámen pro navrhované teorie (i když samozřejmě k jednoznačnému výběru správné teorie byl nedostačující).

2.4) Úspěchy, potíže a meze použitelnosti staré kvantové teorie

Stará kvantová teorie, ve své konečné podobě, umožnila značný pokrok ve studiu spekter, neboť dávala obecný návod k výpočtu spektrálních termů určité třídy atomových a molekulárních soustav. Výsledky získané pro atom vodíku bylo možné snadno zobecnit na ionty He^+ , Li^{++} a atomy alkalických kovů; teorie byla rovněž použitelná na vibrační a rotační spektra molekul a na rentgenovská spektra atomů. Na druhé straně však narážela na značné potíže při řešení problému složitějších atomů; dokonce se ani nepodařilo dosáhnout přesné shody s pozorovaným spektrem atomu He.

Stará kvantová teorie však nebyla úplná. K jejím vážným omezením patřila skutečnost, že pravidla kvantování byla použitelná pouze na periodické pohyby. Tak zůstávala mimo rámec této teorie např. celá problematika srážek (rozptylu) mikročástic; přitom do této kategorie patří i jedny ze základních experimentů: Franckovy-Hertzovy pokusy z r. 1914, potvrzující existenci diskretních energiových hladin v atomu (viz [8]).

Principiální obtíže staré kvantové teorie však spočívaly v její logické struktuře. Empiricky zavedená kvantová pravidla představují jen čistě formální omezení, kladená na řešení klasických pohybových rovnic; bez jakéhokoli hlubšího zdůvodnění předepisují, že ze všech možných klasických řešení je třeba ponechat jen nepatrnou podmnožinu, má-li být dosaženo shody s experimentem. Přitom je navíc obtížné sladit dohromady pravidla kvantování s používaným pojmem trajektorie. Existence klasické trajektorie částice znamená, že částice má v každém okamžiku přesně určenou polohu a hybnost a tyto veličiny se spojitě mění s časem. Jak ale potom bude vypadat trajektorie elektronu ve Franckových-Hertzových pokusech, když zde elektron mění svoji energii skokem? Nebo naopak: protože existenci diskretních energiových hladin (předávání energie po kvantech) lze považovat za experimentálně prokázanou, bude zřejmě nutné opustit představu klasické trajektorie u mikročástic.

Stará kvantová teorie, tato podivuhodně vymyšlená kombinace klasické mechaniky a ad hoc zavedených kvantových pravidel, tedy nebyla - navzdory ohromným zásluhám, které si v historii fyziky vydobyla - úplnou, logicky bezespornou fyzikální teorií.