

Kvantová čísla

Kvantová čísla popisují chování kvantového systému. Matematicky jde o parametry řešení Schrödingerovy rovnice příslušného systému. Toto řešení se obvykle značí $\Psi(\vec{r}, t)$ a nazývá se **vlnová funkce**. Druhá mocnina vlnové funkce^[pozn. 1] má význam hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu.^[1]

Atomový orbital

Vlnová funkce ψ popisující konkrétní elektron konkrétního atomu se označuje jako **atomový orbital** (AO); stejný výraz je v přeneseném slova smyslu používán i pro **prostor**, v němž se elektron **s největší pravděpodobností vyskytuje**. Elektron se totiž okolo jádra pohybuje po trajektorii, kterou ovšem vzhledem k Heisenbergovu principu neurčitosti nelze zjistit přesně. Zvolením určité hladiny pravděpodobnosti lze pomocí vlnové funkce vymezit a matematicky popsat část prostoru, v níž se bude elektron s danou pravděpodobností nacházet. Pro zjednodušení namísto se tento popis neuvádí ve formě konkrétních vlnových funkcí, ale pouze ve formě parametrů, po jejichž dosazení do obecného řešení bychom získali konkrétní vlnovou funkci. Parametry se nazývají **kvantová čísla**.

kvant. číslo	n	l	typ orbitalu	m	počet orbitalů	max. počet elektronů
K	1	0	1s	0	1	2
L	2	0	2s	0	1	
		1	2p	-1, 0, +1	3	6
M	3	0	3s	0	1	
		1	3p	-1, 0, +1	3	
		2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5	10
N	4	0	4s	0	1	
		1	4p	-1, 0, +1	3	
		2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	5	
		3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7	14

Tabulka kvantových čísel

Jednotlivá kvantová čísla

Řešení Schrödingerovy rovnice (a tím i vlnová funkce ψ a atomový orbital) je kompletně určeno třemi kvantovými čísly: hlavním kvantovým číslem n , vedlejším kvantovým číslem l a magnetickým kvantovým číslem m_l . Elektron v daném orbitalu může navíc nabývat dvou kvantových stavů, proto se popisuje ještě magnetickým spinovým kvantovým číslem m_s . Elektronu samotnému je mezi elementárními částicemi přiřazeno spinové kvantové číslo

$$s = \frac{1}{2}.$$

Hlavní kvantové číslo n

Hlavní kvantové číslo ($n = 1, 2, 3, \dots$) určuje ve vodíkovém atomu celkovou energii elektronu a tedy i slupku, ve které se elektron nachází (K pro $n = 1$, L pro $n = 2$, M pro $n = 3$, N pro $n = 4$, ...). Pro energii elektronu ve vodíkovém atomu platí vztah

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2}.$$

Protože hmotnost elektronu m_e , náboj elektronu e , permitivita vakua ϵ_0 i Planckova konstanta h , lze je shrnout do jediné konstanty k a vztah zapsat jako

$$E_n = -\frac{k}{n^2}.$$

Poznamenejme, že v případě složitějších atomů není energie elektronu určena pouze hlavním kvantovým číslem, ale také kvantovým číslem vedlejším, odtud pravidlo $(n + l)^{[2]}$, které popisuje výstavbový princip (https://cs.wikipedia.org/wiki/Elektronov%C3%A1_konfigurace#V%C3%BDstavbov%C3%BD_princip).

Vedlejší kvantové číslo l

Vedlejší kvantové číslo ($l = 0, \dots, (n - 1)$) souvisí s kvantováním orbitálního momentu hybnosti L . Určuje tvar a symetrii elektronového oblaku, tedy podslupky **s**, **p**, **d**, **f**, **g** a **h**.

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

Konstanta \hbar se nazývá redukovaná Planckova konstanta a platí pro ni

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}.$$

Magnetické kvantové číslo m_l

Magnetické kvantové číslo ($m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$) určuje orientaci orbitalu v prostoru; magnetický orbitální moment (pohyb elektrického náboje vytváří magnetické pole) má opačný směr než orbitální moment hybnosti.

Spinové kvantové číslo s

Spinové kvantové číslo elektronů ale také protonů a neutronů má vždy hodnotu $\frac{1}{2}$, čímž tyto částice řadí mezi fermiony^[pozn. 2]. V případě elektronu je spinový moment hybnosti \mathbf{S} dán jeho spinovým číslem s vztahem

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}.$$

Spin nabitého fermionu se projevuje i jako jeho magnetický moment. Právě představa, že rotující elektron představuje vlastně pohybující se náboj, kolem kterého vznikne magnetické pole, vedla k tomu, že bylo toto číslo pojmenováno jako spinové. Jednou ze základních vlastností mikrosvěta, která se vymyká běžným makroskopickým analogiím, je kvantování. V případě, kdy na atom působí vnějšího magnetické pole, nemůže spinový magnetický moment elektronu zaujímat libovolnou orientaci. Možné jsou pouze dvě orientace, jejich zohledněním jsou tak

možné dvě hodnoty spinového magnetického čísla $m_s = \pm \frac{1}{2}$, tedy průmět do směru vnějšího magnetického pole může nabývat pouze dvou hodnot

$$S_{\text{prumet}} = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

Pauliho vylučovací princip

Pauliho vylučovací princip (též **Pauliho princip výlučnosti**) říká, že v jednom kvantovém stavu se nemohou současně nacházet dva nerozlišitelné fermiony, tedy fermiony s identickými kvantovými čísly. Princip je pojmenován po švýcarském fyzikovi Wolfgangu Paulim (1900–1958).

Protože elektrony jsou fermiony, Pauliho vylučovací princip pro ně také platí. Formulace specifická pro elektrony říká, že v jednom atomu nemohou existovat dva elektrony, které mají všechna kvantová čísla shodná, tedy že se musí nejméně v jednom kvantovém čísle lišit. Tím je mimo jiné dán maximální možný počet elektronů v každé slupce a maximální počet dvou elektronů v každém orbitalu.

Dovolené přechody

Při přechodu elektronu z jedné energetické hladiny do druhé nejsou možné zcela libovolné přechody. Možné (tzv. povolené) jsou jediné ty přechody, kdy se hlavní kvantové číslo n mění libovolně, ale vedlejší kvantové číslo l jen o jedničku.. Ostatní přechody jsou označovány jako zakázané, pravděpodobnost jejich uskutečnění je výrazně nižší než pravděpodobnost, že se uskuteční povolený přechod^[pozn. 3].

Poznámky pod čarou

1. Ve skutečnosti se jedná o druhou mocninu pouze ve speciálních případech, kdy má Schrödingerova rovnice reálné řešení. V případě, že je řešením komplexní funkce, jde o součin Ψ a funkce k ní komplexně sdružené $\overline{\Psi}$.
2. Fermiony jsou elementární částice s poločíselným spinem (tj. jejich spin je lichým násobkem jedné poloviny). Jejich hlavní charakteristikou je to, že pro ně platí Pauliho vylučovací princip (viz následující odstavec). Pojmenovány jsou po italském fyzikovi Enricovi Fermim (1901–1954). Jejich "opakem" jsou bosony pojmenované po indickém matematikovi a fyzikovi Satyendrovi Nathovi Bosemu (1894–1974), které se Pauliho vylučovacím principem neřídí. Pro bosony je obvyklý celočíselný spin. Typickými bosony jsou např. fotony.
3. Důvodem nenulové pravděpodobnosti zakázaného přechodu je existence tunelového jevu. Ten v tomto případě umožňuje elektronu provést s malou ale nenulovou pravděpodobností "dvojskok" přes povolený mezistav, i když na něj nemá dostatek energie.

Odkazy

Literatura

- HRAZDIRA, Ivo a Vojtěch MORNSTEIN. *Lékařská biofyzika a přístrojová technika*. 1. vydání. Brno : Neptun, 2001. 396 s. ISBN 80-902896-1-4.
- MUCK, Alexander. *Základy strukturní anorganické chemie*. 1. vydání. Praha : Academia, 2006. 508 s. s. 36. ISBN 80-200-1326-1.

Související články

- Atom
- Bohrův model
- Elektronový obal těžkých atomů

Externí odkazy

- KUBATOVA, Senta. *Biofot* [online]. [cit. 2011-01-31]. <<https://uloz.to/!CM6zAi6z/biofot-doc>>.
- JANEČEK, Ivan, René KALUS a Daniel HRIVŇÁK. *Kvantová, atomová a jaderná fyzika* [online]. Katedra fyziky PŘF OSU, [cit. 2011-09-21]. <<http://artemis.osu.cz/mm fyz/index.htm>>.
- článek Atomic orbital na anglické Wikipedii
- článek Pauli exclusion principle na anglické Wikipedii
- článek Quantum number na anglické Wikipedii

Reference

1. MUCK, Alexander. *Základy strukturní anorganické chemie*. 1. vydání. Praha : Academia, 2006. 508 s. s. 36. ISBN 80-200-1326-1.
2. MUCK, Alexander. *Základy strukturní anorganické chemie*. 1. vydání. Praha : Academia, 2006. 508 s. s. 44. ISBN 80-200-1326-1.