

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Jarmila Dlouhá; Václav Frei; Václav Pihera
Grafické znázornění atomu vodíku ve stacionárním stavu

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 33 (1988), No. 5, 249--267

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/138322>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1988

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

Grafické znázornění atomu vodíku ve stacionárních stavech

Jarmila Dlouhá, Václav Frei, Praha, Václav Pihera, Plzeň

1. Překvapivé mezery a rozpory v názorném zobrazování atomů

Analytické řešení Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku je známo už více než 60 let [1]. Explicitní vyjádření vlnových funkcí ψ_{nlm} je dostupné v mnoha učebnicích kvantové mechaniky (např. [2], [3]). Zdálo by se tedy, že např. vytvoření názorné představy o hustotě pravděpodobnosti $\rho = |\psi|^2$ v různých stacionárních stavech atomu H je prostá záležitost. Ostatně už r. 1934 uveřejnil White [4] působivé znázornění atomu vodíku v různých stavech pomocí modelových fotografií, které jsou po desetiletí ve světě i u nás opětovně reprodukovány (viz např. [2], [5]).

Význam vlnových funkcí ve fyzice a chemii je mimo pochybnost. Užití nerelativistických vlnových funkcí ψ_{nlm} pro atom vodíku a pak i pro těžší atomy vedlo rychle k zásadnímu pokroku v pochopení chemické vazby (molekula H_2 : [6]) a umožnilo objasnit optická a rentgenová spektra atomů (včetně výběrových pravidel a intenzity spektrálních čar) i periodickou soustavu prvků dokonaleji, než to dokázala tzv. „stará“, tj. bohrovská kvantová teorie. Souhlas mezi teorií elektronových stavů atomů a experimentem byl postupně ještě znamenitě zlepšen relativistickými a dalšími opravami, o nichž se zmíníme později. Tyto opravy se však dotýkají především – a zpravidla nepatrně – vlastních hodnot energie. Popis stavů $|nlm\rangle$ pomocí vlnových funkcí ψ_{nlm} je tedy velmi dobře a široce potvrzen experimenty. Totéž lze tvrdit i o jednoelektronových vlnových funkcích pro atomy s více elektrony, jak vyplývají ze selfkonzistentního řešení rovnic Hartreeových [7] nebo Fockových [8].

Popis stacionárních stavů elektronů v atomech, významný a v principu dobře známý už déle než půl století, začíná v posledních letech zřetelněji pronikat i do středoškolské výuky chemie a fyziky. Vhodné, tj. fyzikálně korektní a přitom srozumitelné zobrazování stacionárních stavů atomů je proto velmi žádoucí pro přípravu učitelů i výuku žáků středních (dokonce i základních [9]) škol. Speciálně hustota pravděpodobnosti ρ – nebo ekvivalentně střední hustota elektrického náboje $-e\rho$ – je přitom veličinou zvlášť vhodnou k názornému zobrazení. Je totiž na rozdíl od vlnové funkce ψ reálná a zásadně měřitelná. Hledáme-li však v literatuře vhodné ilustrace k „tvaru a velikosti“ atomů, shledáme, že situace je překvapivě málo uspokojivá.

Mnoho učebnic, zejména vysokoškolských (např. [10], [11], [12]), ale i úvodů do kvantové mechaniky [13] názorné stránce výkladu věnuje málo pozornosti. Horší je, že ilustrace uváděné v literatuře bývají neúplně doprovázeny textem (i např. [11], str. 174) a ještě častěji nezachovávají měřítko [3], popř. bez upozornění [2], [14]. O dalších nedostatcích se zmíníme ve 3. a 4. části článku. S chybným znázorněním

základního stavu $1s$ atomu vodíku se v naší i zahraniční literatuře setkáváme až příliš často. Např. bývá v místě jádra ukazována minimální nebo i nulová hustota ρ . Místo skličujícího výčtu pramenů uveďme pouze obr. 45 v donedávna platné gymnaziální učebnici [14].

Nelze se pak divit, že tytéž nejasnosti a chyby se objevují i v popularizující literatuře. Shodou okolností vyšly u nás nedávno tři pěkné knížky pro mládež, z nichž dvě – překlady z angličtiny, určené při výběru látky i ilustrací v podstatě originálem – zobrazují atomy buď jako kuličky, nebo užívají Bohrova modelu [15], [16]. Ojediněle zmínky o schrödingerovském popisu (např. v [16] na str. 44 a 115) zůstávají nevyužity pro vytváření názorných představ. Třetí, jinak velmi záslužná původní publikace [17] zůstala v tomto směru pouhým náběhem a spíše nevyužitou šancí. Názorným představám o atomech je v ní věnováno mnohem více místa, než je k dispozici ve školních učebnicích chemie a fyziky, autor i výslovně zdůrazňuje provizornost Bohrova modelu (str. 16, 33 aj.), ale zobrazování stacionárních stavů elektronů je opět zatíženo nedostatky a omyly, které chceme v tomto článku uvést na pravou míru. A k výkladu fyzikálně významných skutečností, jako je periodická soustava (str. 38 aj. aj.) nebo zářivé přechody (str. 144), se užívá jen Bohrova modelu.

Celkem vzato je úloha korektně si představit prostorové rozložení veličiny $|\psi|^2$ – pro žáky a leckdy i pro učitele ne právě triviální – neúměrně ztížena daným stavem literatury, v níž lze sotva najít alespoň dílčí zobrazení plně uspokojivé.

Tato nesnáze se ukazuje jako skutečně povážlivá na pozadí vývoje fyziky atomů, kvantové chemie a fyziky pevných látek v posledních desetiletích. Teoretické výpočty elektronových stavů v atomech s více elektrony pokračovaly zprvu zvolna pro velkou numerickou náročnost. Soupis atomů a iontů, pro něž byly k dispozici selfkonzistentní výpočty, se ještě v půli padesátých let omezoval na 46 prvků [18]. Počítače však umožnily mezery rychle zaplnit. V r. 1963 byly publikovány selfkonzistentní výpočty elektronových stavů všech atomů s protonovými čísly $2 \leq Z \leq 103$ v tabelární formě [19], postupně jsou uveřejňovány programy takových výpočtů i různé analytické aproximace k Hartreeovým-Fockovým funkcím (viz [20], str. 191). Náročný selfkonzistentní postup je v rostoucí míře úspěšně aplikován i u molekul a krystalů. Po experimentální stránce lze v krystalech metodami rentgenové strukturní analýzy dobře zjišťovat právě hustotu elektrického náboje úměrnou $|\psi|^2$. Pěkný příklad (pocházející už z r. 1957) je uveden v nedávno vyšlé učebnici [21] na str. 101; srov. též [22]. Měření hustoty náboje v krystalech dosáhla mezitím takové přesnosti, že mohou sloužit jako citlivý test zmíněných náročných teoretických výpočtů [23]. – V aktuální a intenzívně rozvíjené experimentální metodě jaderné magnetické rezonance (JMR) hraje významnou roli hustota elektronů náboje v místě jádra atomu, tj. veličina $-e|\psi(0)|^2$ (viz např. [21], str. 504 a 507). Poněvadž u všech atomů daleko největší příspěvek k ní pochází od elektronů ve stavu $1s$, není výše zmíněná záměna maxima za minimum pouhým neškodným nedopatřením*).

Korektní a názorné zobrazení elektronového obalu atomů lze tedy z mnoha důvodů

*) Hodnota $|\psi(0)|^2$ je ostatně významná i v jaderné fyzice v souvislosti se záchytem elektronů jádrem ([2], str. 417).

pokládat za aktuální úkol. Mezi příspěvky k jeho realizaci u nás patří doplněk F v českém překladu Davydovovy učebnice [24] a zejména diplomová práce [25], na niž z velké části navazuje a dále ji rozvíjí tento článek. Ve všech těchto případech jde o stavy atomu vodíku, které jsou však důležitým klíčem k popisu stacionárních stavů všech atomů.

2. Schrödingerova rovnice pro atom (ion) s jedním elektronem

V učebnicích kvantové mechaniky se zpravidla řeší stacionární Schrödingerova rovnice s hamiltoniánem \hat{H}

$$(1) \quad \hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = \psi E$$

pro částici s nábojem $-e$ a hmotností μ – volíme písmeno odlišné od kvantového čísla m – v coulombovském poli bodového jádra o náboji $+Ze$ ($\hbar = h/2\pi$, kde h je Planckova konstanta; ϵ_0 značí permitivitu vakua). Je-li $Z = 1$ a „obíhající“ částici je elektron s hmotností m_e , jde o problém atomu vodíku v nejjednodušší formulaci. Rovnici (1) vyhovují vlastní funkce ψ a vlastní hodnoty energie E hamiltoniánu \hat{H} . Pro $E < 0$ dostáváme vázané stavy $|nlm\rangle$ popsané vlnovými funkcemi tvaru

$$(2) \quad \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi),$$

kde r, ϑ, φ jsou sférické souřadnice s počátkem v těžišti atomu a celočíselné indexy n, l, m jsou po řadě hlavní, orbitální a magnetické kvantové číslo. Je běžné, a jak uvidíme, výhodné při zápisu vlnových funkcí vyjadřovat délky pomocí známého Bohrova poloměru, tj. veličiny

$$(3) \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \doteq 5,292 \cdot 10^{-11} \text{ m}.$$

Vlastním funkcím (2) odpovídají n^2 -krát degenerované hladiny energie

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} \quad (|E_1| \doteq 13,6 \text{ eV je ionizační energie atomu vodíku}).$$

Tvar vlastních funkcí (2) s kulovými funkcemi Y_{lm} vyplývá ze sférické symetrie hamiltoniánu v rovnici (1). Radiální funkce R_{nl} jsou pro atom vodíku známy i analyticky. Normované funkce (2) zde budeme pokládat za známé i s nerovnostmi omezujícími kvantová čísla. Připomeňme pouze, že pro $l > 0$ jsou kulové funkce Y komplexní.

Rovnice (1) s celočíselným kladným Z popisuje elektron v coulombovském poli v okolí jádra prvku ${}_Z X$, t.j. např. ion $\text{He}^+, \text{Li}^{++}$ atd. Příslušné vlastní hodnoty a vlastní funkce pro tyto soustavy lze snadno najít modifikací řešení pro atom vodíku. Ve formulaci (1) je ovšem zanedbáno několik fyzikálních skutečností, které mohou být významné zejména pro $Z \gg 1$ (viz další výklad). Nyní je však důležité, že pro atom vodíku ($Z = 1$) řešení (2) pro naše účely plně vyhovují, dokonce s vysokou přesností.

3. Realistické grafické znázornění hustoty pravděpodobnosti pro atom vodíku

Na základě vlastních funkcí (2) můžeme snadno určit hodnotu hustoty pravděpodobnosti v libovolném stavu $|nlm\rangle$ pro libovolný bod v blízkosti jádra atomu. Není však snadné trojrozměrné skalární pole $\rho(\mathbf{r})$ názorně graficky zobrazit: ve hře jsou čtyři

veličiny x, y, z a ϱ – a zpravidla jen dvojrozměrný papír. Je možno např. najít v prostoru pro daný stav plochu (nebo plochy) konstantní hustoty pravděpodobnosti $\varrho = \varrho_{\text{konst}}$ a užít perspektivního zobrazení [26].* Jinou možností je vyjádření hodnoty ϱ barvou, např. stupnicí šedi. Vyšší hodnotě ϱ někdy odpovídá tón světlejší [3], [4], jindy tmavší, realizovaný např. tečkováním [14], [22]. Přitom ještě může být obrázek pojat jako pohled na celý atom [4] nebo jako rovinný řez atomu [3], [22]. V případě řezů se nyní s oblibou hodnota ϱ znázorňuje pomocí počítače jako výška $\varrho(x, y_i)$ zakřivené plochy nad rovinou xy v šikmém průmětu pro ekvidistantní hodnoty y_i [27]. Správné pochopení takýchto grafů vyžaduje prostorovou představivost, ale i patřičnou matematickou průpravu. Proto se ne vždy hodí pro elementární výklad, zejména není-li ani srozumitelně vyložena způsob zobrazení. Žák může být zmaten tím spíše, že se často užívá i polárních diagramů [2], [24], jejichž princip je zcela odlišný.

V práci [25] byl zvolen snadno srozumitelný způsob zobrazení $\varrho(\mathbf{r})$ pomocí „vrstevnic“ konstantní hustoty ϱ_k v řezech souřadnicovými rovinami jdoucími počátkem, t. j. jádrem atomu. Kromě vrstevnic odpovídajících hodnotám

$$(4) \quad \varrho_k = k\varrho_1, \quad \varrho_1 = 10^{-5}a_0^{-3} \doteq 6,748 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3},$$

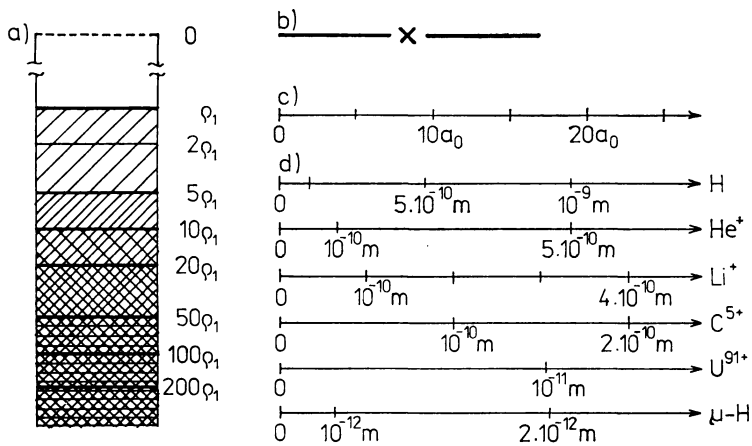
$$k = 0, 1, 2, 5, 10, 20, 50, 100, 200, 500, 1000, 2000, 5000, 10\,000, 20\,000$$

byly ještě určeny a zakresleny body, popř. čáry ϱ_{max} . Všechny grafy byly provedeny v jednotném měřítku na listech formátu A 4 pro snazší porovnání. Vrstevnice pro $\varrho_2 = 2\varrho_1$ se uplatňují jen při $n = 4$. Takto byly zpracovány všechny stavy $|nlm\rangle$ s $n \leq 4$ a reálné lineární kombinace dvojic vlnových funkcí $\psi_{k,l,\pm|m|}$ užívané běžně v kvantové chemii (podrobněji viz Dodatek a [24]). Příslušné výpočty byly provedeny na počítači HP 9830A, grafy byly nakresleny souřadnicovým zapisovačem HP 9862 A.

O programu přizpůsobeném dostupnějšímu počítači IQ 151 se zmíníme později.

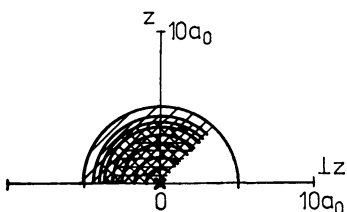
Pro článek v časopise bylo nutno grafy podstatně zmenšit, takže nepřicházejí v úvahu podrobné údaje o $\varrho_k, \varrho_{\text{max}}$ atp. přímo v obrázcích. Zato byly oblasti různé hustoty zvýrazněny šrafováním se společnou stupnicí (obr. 1). Oblasti hustot $\varrho > 50\varrho_0$ se vyskytují zřídka a nejsou už rozlišeny hustším šrafováním. Z vrstevnic ležících těsně u sebe byly některé na hlavním obrázku vypuštěny a zobrazeny v detailu na výřezu (obr. 2, 3). Význam délkových měřítek uvedených na obr. 1 bude vysvětlen v 6. části. Z celkového počtu 32 grafů v [25] jsme vybrali ukázky, na nichž lze sledovat typické vlastnosti rozdělení hustoty ϱ v různých stavech. Dodejme, že v kvantové chemii jsou významné především stavy np charakteristické pro obal lehkých atomů (H, C, N, O, Na a j.), nověji též stavy nd (u přechodových prvků) a dokonce nf (u prvků vzácných zemin). Grafy ukazují hustotu $\varrho(\mathbf{r})$ vždy jen v řezu polorovinou. K doplnění prostorové představy je třeba předně si uvědomit, že obraz v druhé polorovině by byl osově symetrický – typicky bývá $\varrho(x, y, -z) = \varrho(x, y, z)$. A za druhé, že veličina $|\psi_{nlm}|^2$ je vždy též rotačně symetrická podle osy z , což neplatí o hustotách odvozených z reálných kombinací funkcí ψ_{nlm} a $\psi_{n,l,-m}$, $m \neq 0$. Tak znázornění stavu $2p_z$ připomíná dva bochníky navlečené na osu z , u stavu $2p_x$ (nebo $2p_y$) jde o stejné „bochníky“ na ose x nebo y . Naproti

*) Hodnotu ϱ_{konst} lze v tomto případě volit libovolně. O hraničních plochách se zmíníme v další části článku.

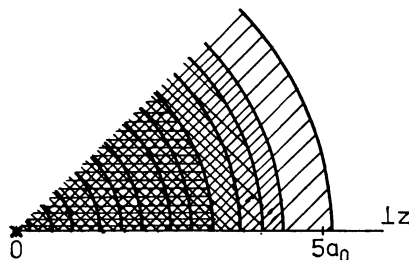


Obr. 1. a) Šrafování a kontury (spec. pro $q = 0$) oblastí s různou hustotou pravděpodobnosti. b) Značení q_{\max} . c) Lineární měřítko v jednotkách a_0 společné pro všechny další obrázky. d) Měřítka pro soustavy H ($C = 1,00054$), He⁺, Li²⁺, C⁵⁺, U⁹¹⁺ ($C = 1,087 \cdot 10^{-2}$) a mionový atom H ($C = 5,38 \cdot 10^{-3}$). Pozn.: Na obrázku je nedopatřením Li⁺.

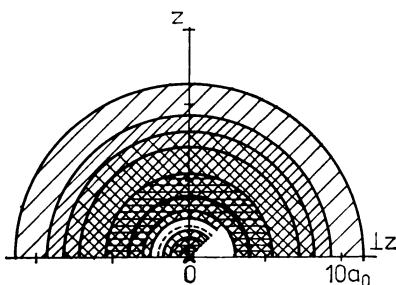
$n=1, l=0, m=0$



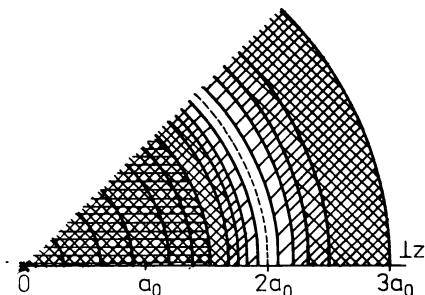
Obr. 2. Graf hustoty pravděpodobnosti q pro stav $1s$ (ψ_{100}) atomu vodíku. Maximální hodnota q : $3,18 \cdot 10^4 q_1$. Detail je 4krát zvětšen.



$n=2, l=0, m=0$

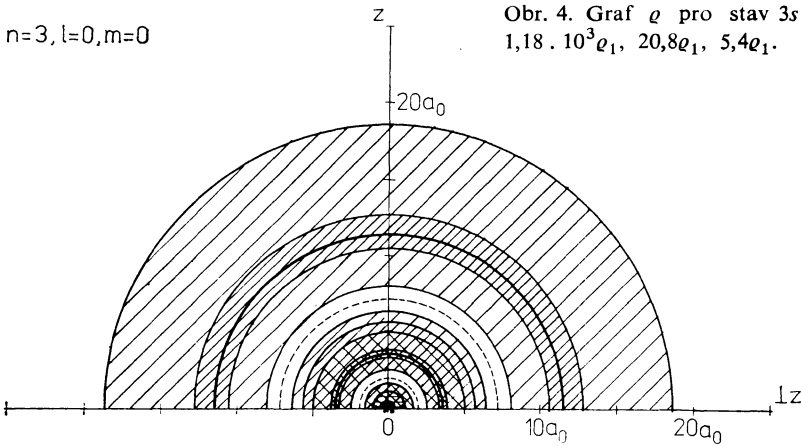


Obr. 3. Graf q pro stav $2s$ (ψ_{200}). Maxima: $3,98 \cdot 10^3 q_1$, $72,9 q_1$. Detail je 8krát zvětšen.



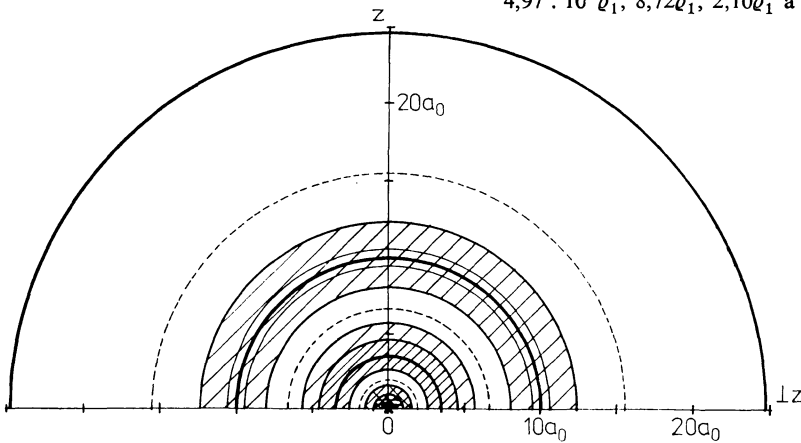
tomu hustota $|\psi_{211}|^2$ má rotační symetrii a tvoří jakýsi tlustý prstenec kolem osy z . Porovnání obrázků 7 a 8 ukazuje proto u prstence nižší hodnoty ϱ ve srovnatelných bodech, např. pro $\varrho = \varrho_{\max}$.

$n=3, l=0, m=0$



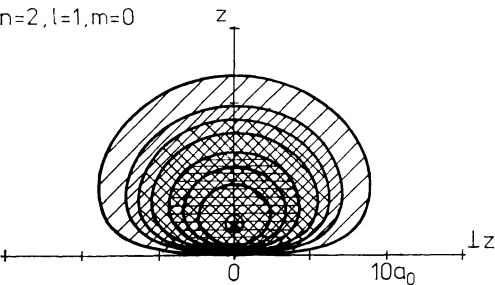
Obr. 4. Graf ϱ pro stav $3s$ (ψ_{300}). Maxima: $1,18 \cdot 10^3 \varrho_1, 20,8 \varrho_1, 5,4 \varrho_1$.

$n=4, l=0, m=0$

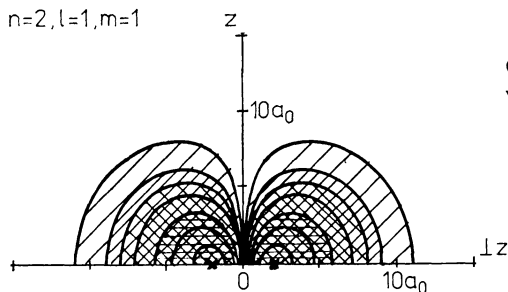


Obr. 5. Graf ϱ pro stav $4s$ (ψ_{400}). Maxima: $4,97 \cdot 10^2 \varrho_1, 8,72 \varrho_1, 2,10 \varrho_1$ a $0,92 \varrho_1$.

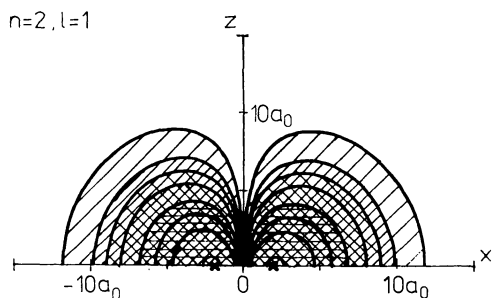
$n=2, l=1, m=0$



Obr. 6. Graf ϱ pro stav $2p_z$ (ψ_{210}). Maxima: $5,38 \cdot 10^2 \varrho_1$.



Obr. 7. Graf ρ pro stav popsaný komplexní vlnovou funkcí ψ_{211} . Maximum: $2,69 \cdot 10^2 \rho_1$.



Obr. 8. Graf ρ pro stav $2p_x$ ($\psi_{21}^{(1)}$, viz Dodatek). Maxima: $5,38 \cdot 10^2$ jako na obr. 6.

4. K interpretaci vrstevnicových grafů v porovnání s jinými způsoby zobrazení stavů atomu vodíku

Díky zachování stejného měřítka jsou ihned zřejmé značné rozdíly ve velikosti oblastí, v nichž se elektron v různých stavech vyskytuje se značnou pravděpodobností. Tyto rozdíly bývají též v literatuře znázorňovány tzv. hraničními plochami $\rho = \rho_P$ určenými tak, aby úhrnná pravděpodobnost výskytu elektronu v části prostoru vymezené hraniční plochou byla rovna zvolené hodnotě P , obvykle 0,9. Hraniční plochy pro kulově symetrické rozdělení $\rho(r)$ odpovídající stavům ns (tj. $l = 0$) jsou koule poloměru R_P . Podle tab. 6.1 v [25] je např.

$$R_{0,9}(1s) = 2,66a_0, \quad R_{0,9}(2s) = 9,13a_0, \quad R_{0,9}(3s) = 19,44a_0, \\ R_{0,9}(4s) = 33,62a_0.$$

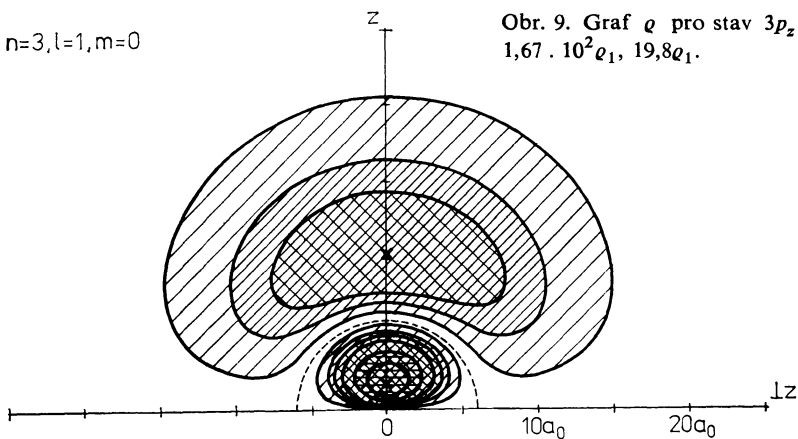
Zobrazení jedinou koulí ovšem neukazuje nehomogenní rozdělení $\rho(r)$ uvnitř této koule ani nenaznačuje rozplývavou hranici oblasti, v níž je $\rho \neq 0$. Navíc je značně pracné zkonstruovat hraniční plochy pro stavy s $l > 0$ (viz [25], str. 67–71). Nejsou totiž kulově symetrické ani jednoduše souvislé a příslušná integrace je obtížná. Proto se užití korektních hraničních ploch*) prakticky omezuje na stavy ns .

Naproti tomu na vrstevnicových grafech vidíme průběh $\rho(r)$ tak podrobně, že z něho

*) BEISER ([3], str. 305) sice definuje uvedeným způsobem hraniční plochy, ale ihned dodává, že na obrázcích hraničních ploch vlastně uvádí jen úhlové části $|Y|^2$. Jiní autoři patrně postupují stejně, avšak bez výslovného upozornění.

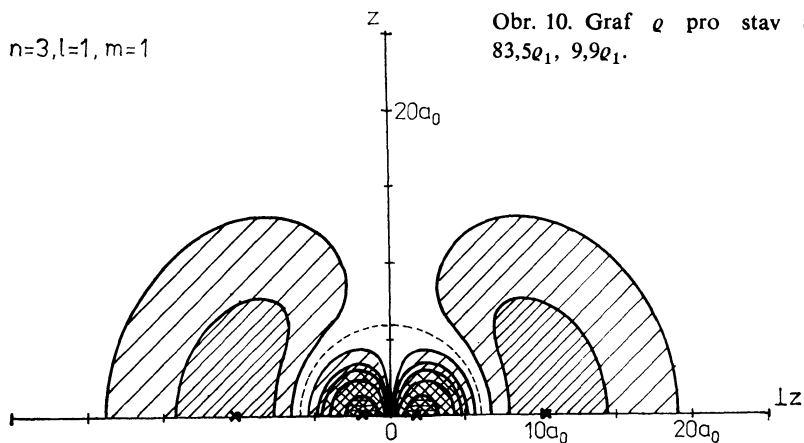
můžeme vyvozovat i kvantitativní závěry. Výrazné maximum pro $r = 0$ ve stavu $1s$ bije do očí. Rozplývavé ohraničení je alespoň zřetelně naznačeno.

$$n=3, l=1, m=0$$



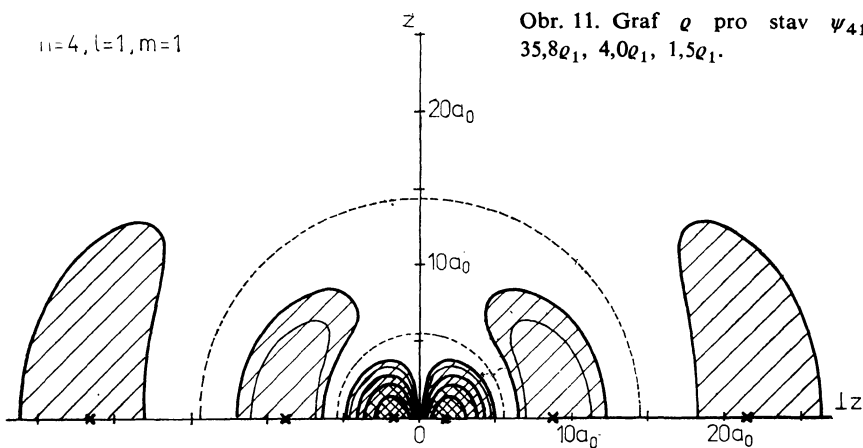
Obr. 9. Graf q pro stav $3p_z$ (ψ_{310}). Maxima: $1,67 \cdot 10^2 \varrho_1, 19,8 \varrho_1$.

$$n=3, l=1, m=1$$



Obr. 10. Graf q pro stav ψ_{311} . Maxima: $83,5 \varrho_1, 9,9 \varrho_1$.

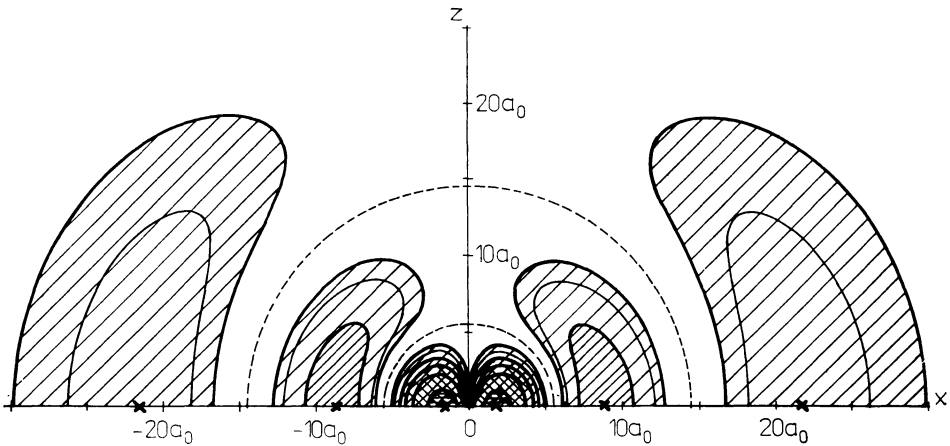
$$n=4, l=1, m=1$$



Obr. 11. Graf q pro stav ψ_{411} . Maxima: $35,8 \varrho_1, 4,0 \varrho_1, 1,5 \varrho_1$.

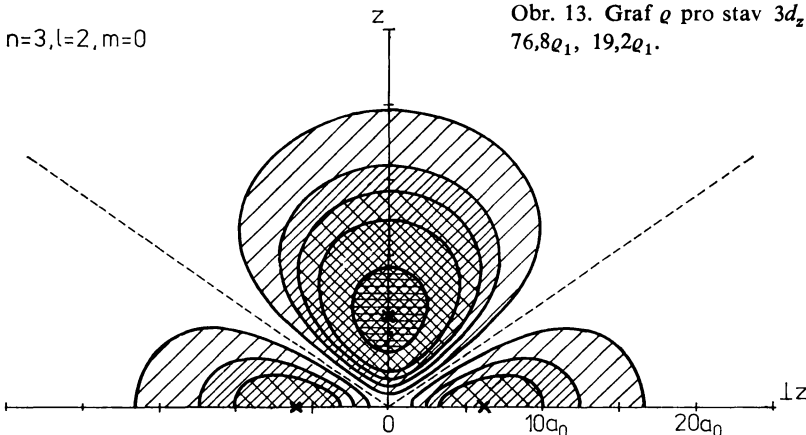
Na uvedených vrstevnicových grafech pokládáme za cennou zejména fyzikálně korektní informaci o tvaru „elektronového oblaku“ ve stavech bez kulové symetrie. Přímý výpočet drasticky koriguje četné obrázky tradované v literatuře. Např. řez stavem $2p_z$ (který je popsán vlnovou funkcí ψ_{210} , viz obr. 6) bývá často zobrazován ve tvaru dosti štíhlé [3] nebo i velmi štíhlé [28] osmičky. Kromě toho bývají zcela stejně znázorňovány též další stavy np_z atomu vodíku i dalších prvků, ačkoli už pro atom H je závislost na kvantovém čísle n výrazná kvalitativně i kvantitativně. Je tomu nejspíš tak, že v odborných publikacích kvantové chemie a jinde se mlčky užívá silně stylizovaných grafů, které vyjadřují pouze směr „laločků“ $|\psi|^2$ nebo ψ a pomíjejí jeho šířku, dosah, počet maxim a uzlů i další podrobnosti, které vidíme na obrázcích 6, 9 nebo obdobně 12. Odborníky takovéto zjednodušené náčrty patrně neuvedou do rozpaků. Jiná otázka je, zda se mají bez komentáře předkládat jako jediná grafická informace studentům, kteří se teprve se stavy atomů seznamují.

$$n=4, l=1$$



Obr. 12. Graf ρ pro stav $4p_x$ ($\psi_{41}^{(1)}$). Maxima: $71,1\rho_1$, $8,0\rho_1$, $3,0\rho_1$ (srov. s obr. 11).

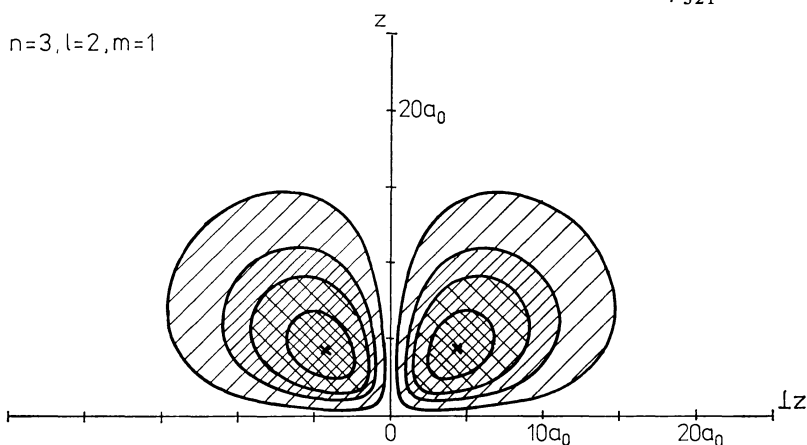
$$n=3, l=2, m=0$$



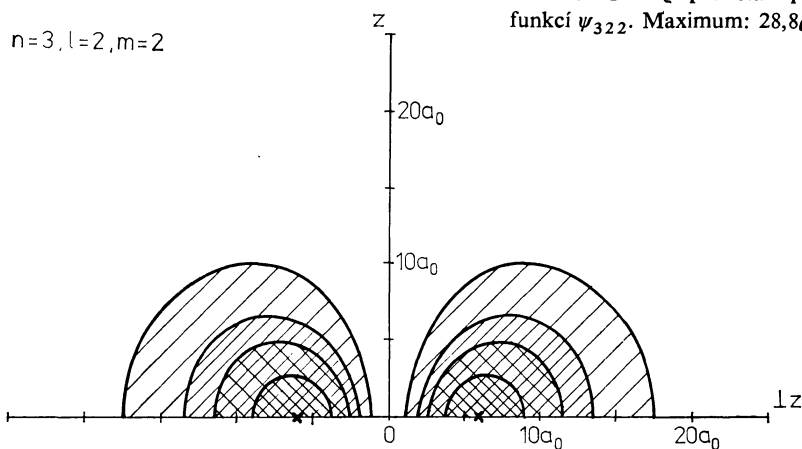
Obr. 13. Graf ρ pro stav $3d_{z^2}$ (ψ_{320}). Maxima: $76,8\rho_1$, $19,2\rho_1$.

Podobně může studenty mást, není-li v publikovaných grafech uvedeno, jaká veličina je vynášena na osách v obrázku a v jakých jednotkách (viz např. [29]). Na vrstevnicových grafech v [25] a v našem článku je na osách vzdálenost od těžiště atomu udávána v Bohrových poloměrech (4), hustota ρ v násobcích veličiny a_0^{-3} , která vyjadřuje pravděpodobnost na objem. Vzhledem k normování vlnových funkcí podmínkou $\int |\psi|^2 dV = 1$ je povšechně hodnota ρ tím menší, čím větší je objem oblasti, kde je $\rho \neq 0$ (nápadně u stavů s $n > 2$). Délky jsme mohli též uvádět v metrech a hustotu v m^{-3} , převod ukazují vztahy (3) a (4). Užití Bohrova poloměru je však výhodné větší obecností, jak uvidíme v 6. části. Dříve však bude na místě uvést několik fyzikálních upřesnění.

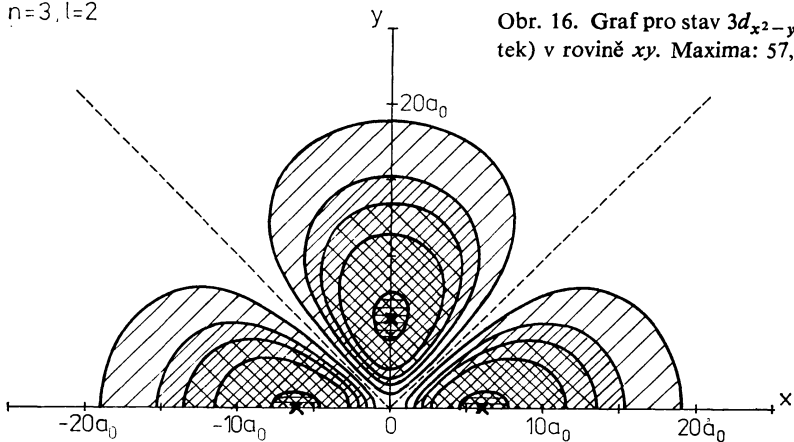
Obr. 14. Graf ρ pro stav popsany komplexní vlnovou funkcí ψ_{321} . Maxima: $28,8\rho_1$.



Obr. 15. Graf ρ pro stav popsany komplexní funkcí ψ_{322} . Maximum: $28,8\rho_1$ jako na obr. 14.

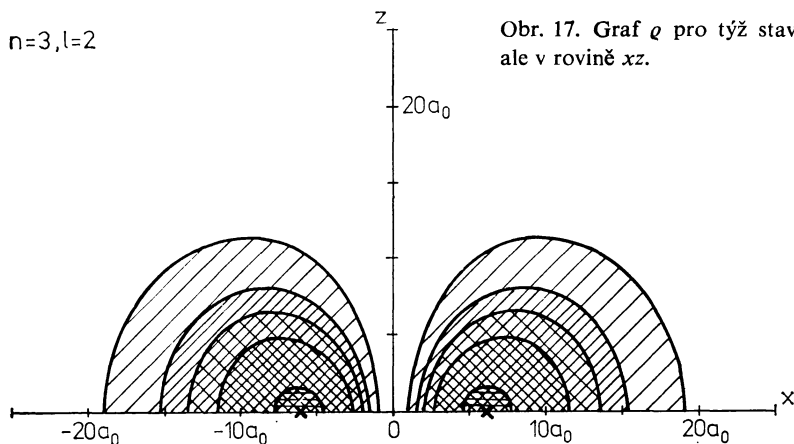


$n=3, l=2$



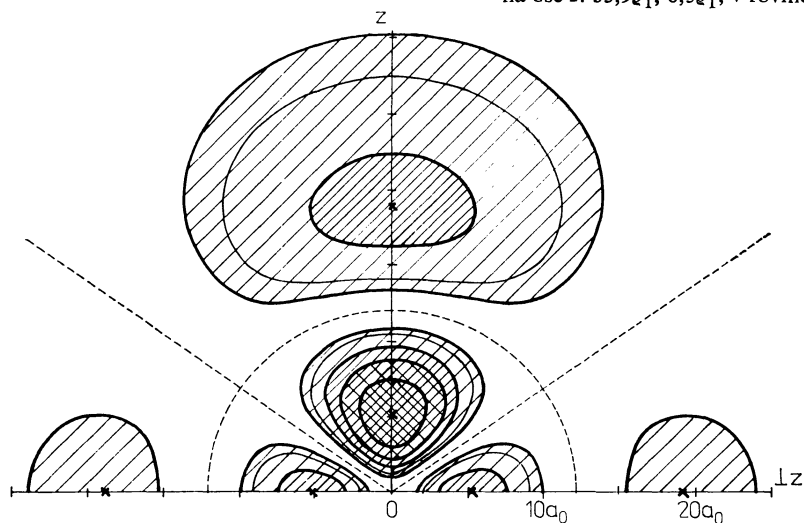
Obr. 16. Graf pro stav $3d_{x^2-y^2}$ ($\psi_{32}^{(2)}$, viz Dodatek) v rovině xy . Maxima: $57,6\varrho_1$.

$n=3, l=2$



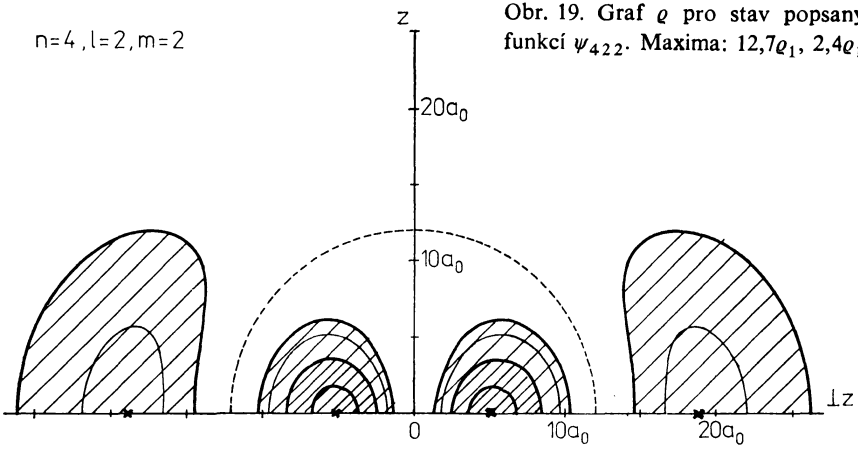
Obr. 17. Graf ϱ pro tžž stav jako na obr. 16, ale v rovině xz .

$n=4, l=2, m=0$



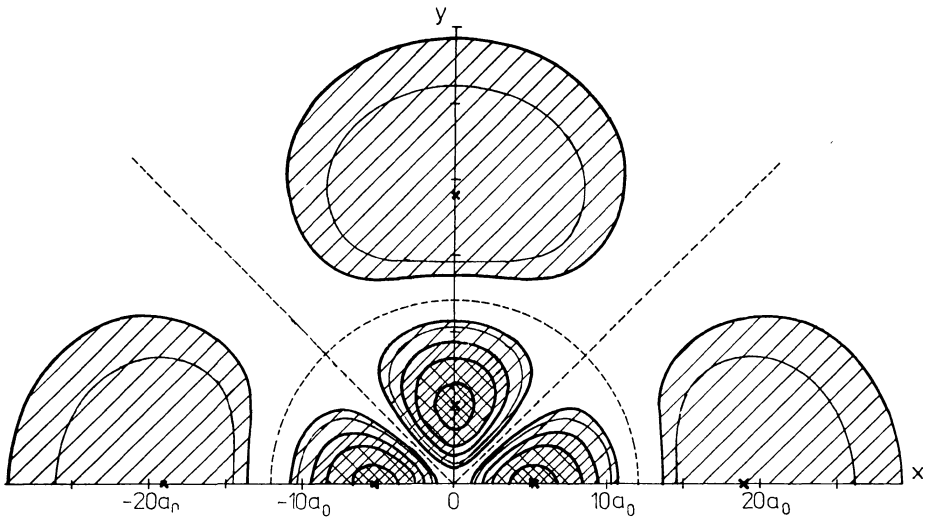
Obr. 18. Graf ϱ pro stav $4d_{z^2}$ (ψ_{420}). Maxima na ose z : $33,9\varrho_1, 6,5\varrho_1$; v rovině xy : $8,5\varrho_1, 1,6\varrho_1$.

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



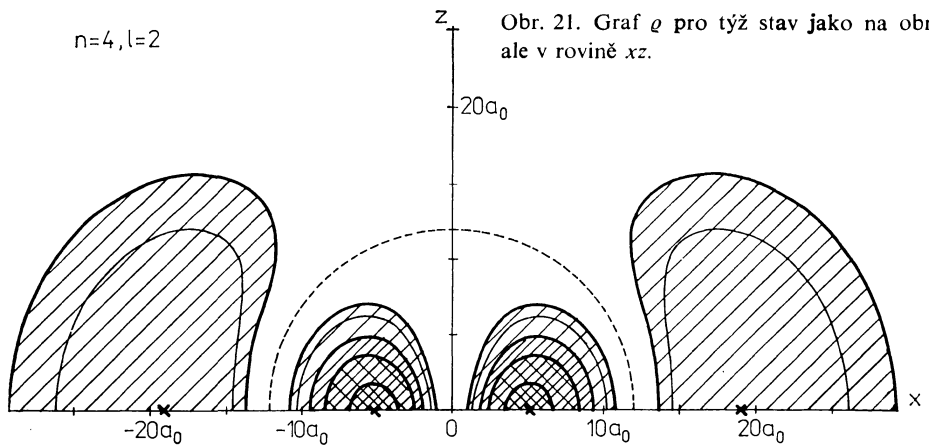
Obr. 19. Graf ρ pro stav popsany komplexni funkci ψ_{422} . Maxima: $12,7\varrho_1, 2,4\varrho_1$.

$n=4, l=2$



Obr. 20. Graf ρ pro stav $4d_{x^2-y^2}$ ($\psi_{42}^{(2)}$) v rovine xy . Maxima: $25,5\varrho_1, 4,8\varrho_1$.

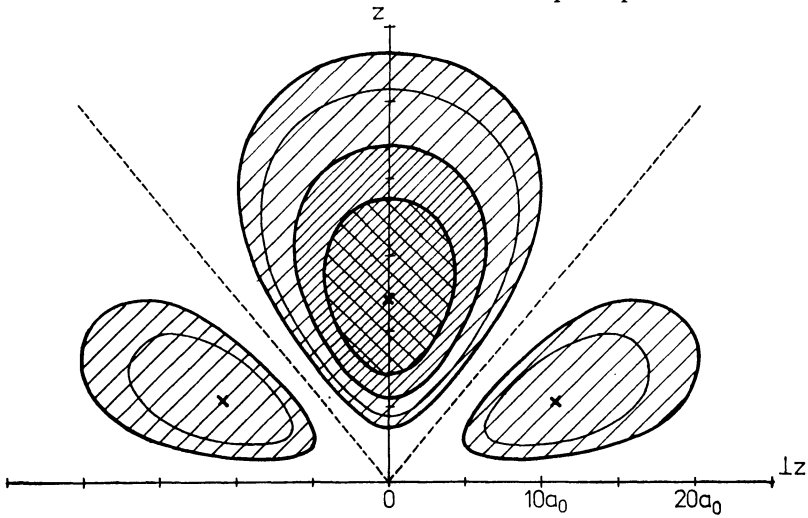
$n=4, l=2$



Obr. 21. Graf ρ pro t'ez stav jako na obr. 20, ale v rovine xz .

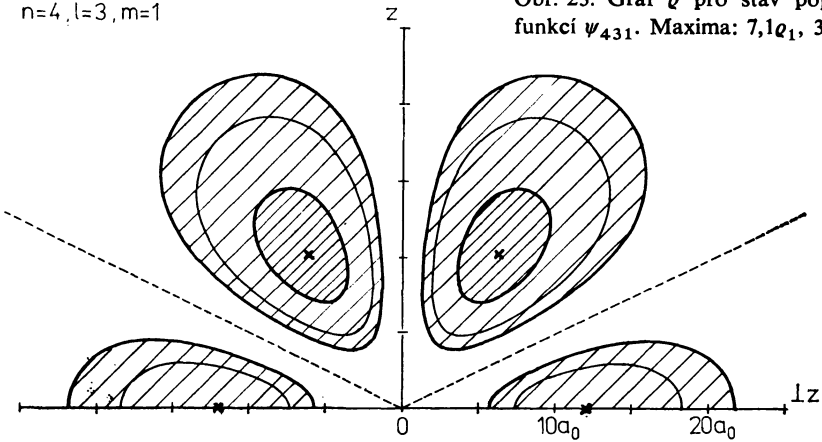
$n=4, l=3, m=0$

Obr. 22. Graf ϱ pro stav $4f_{z^3}$ (ψ_{430}). Maxima: $20,0\varrho_1, 4,0\varrho_1$.



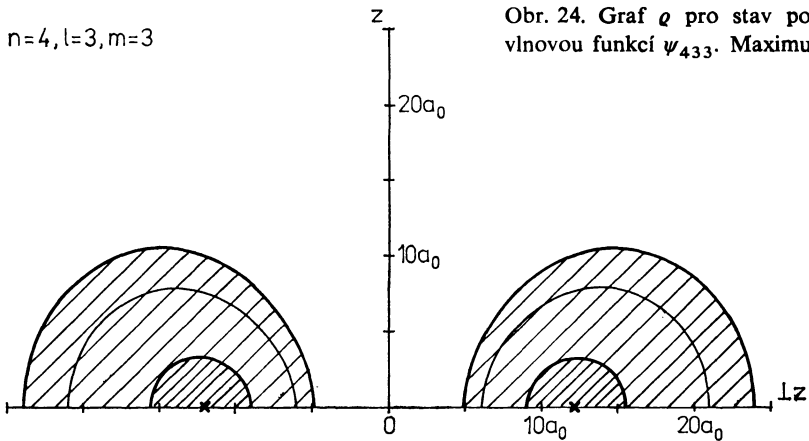
$n=4, l=3, m=1$

Obr. 23. Graf ϱ pro stav popsaný komplexní funkcí ψ_{431} . Maxima: $7,1\varrho_1, 3,7\varrho_1$.



$n=4, l=3, m=3$

Obr. 24. Graf ϱ pro stav popsaný komplexní vlnovou funkcí ψ_{433} . Maximum: $6,2\varrho_1$.



5. Reálný atom (ion) s jedním elektronem a jeho popis rovnicí (1)

Schrödingerovu rovnici (1), příslušné vlastní hodnoty energie a vlastní funkce (2) můžeme pokládat za zjednodušený matematický model [30] soustavy podobné atomu vodíku, přesněji bodového náboje umístěného v počátku a jediné opačně nabitě částice v jeho coulombovském poli. Formulace (1) tak zanedbává jednak vlastnosti atomového jádra, totiž jeho hmotnost, magnetický moment a konečnou velikost, jednak kvantové vlastnosti elektromagnetického vakua. Navíc je to rovnice nerelativistická, místo přesnější rovnice Diracovy, jejíž řešení je též podrobně známo [24]. Tyto okolnosti můžeme respektovat opravami, které jsou v případě atomu vodíku velmi jemné, zejména pokud jde o vlastní funkce a hustotu pravděpodobnosti ϱ , o níž tu hlavně pojednáváme. Jejich význam více vystoupí do popředí při zobecňování uvedených výsledků na další soustavy.

Konečnou hmotnost M jádra respektujeme, jak známo, redukovanou hmotností μ_r místo μ v rovnicí (1) i ve vztazích, které z ní vyplývají. Platí

$$(5) \quad \mu_r = \mu \left(1 + \frac{\mu}{M} \right)^{-1}.$$

Relativistické opravy (viz [24], § 67) lze mj. chápat jako důsledek závislosti hmotnosti μ na rychlosti „obíhající“ částice, u elektronu souvisí navíc i s jeho spinem. Projevují se zejména spin-orbitální interakcí, která vede k jemné struktuře spektrálních čar atomu vodíku ([31], § 51). Interakce magnetických momentů jádra a elektronu způsobuje hyperjemnou strukturu čar, interakce elektronu s vakuem vede k tzv. Lambovu posuvu ([2]; [24], § 67; [31], § 106), objevenému a vysvětlenému až kolem r. 1950. Zcela nepatrný vliv má u vodíku velikost jádra (poloměr $r_j \approx 10^{-15} \text{ m} \ll a_0$). A jak už bylo řečeno, průběh $\varrho(r)$ je všemi těmito opravami ovlivněn méně než vlastní hodnoty energie.

Naproti tomu větší náboj jádra, Ze , výrazně modifikuje energetické spektrum i průběh $\varrho(\mathbf{r})$ v prostoru. Vlivem náboje a konečné hmotnosti jádra se však ve vztazích pro E_n , ψ_{nlm} platných pro atom vodíku prostě objeví modifikovaný „první Bohrov poloměr“ příslušné soustavy

$$(6) \quad \bar{a}_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Z\mu_r e^2} = \frac{m_e}{Z\mu_r} a_0 = C a_0, \quad C = C(\mu, M, Z)$$

místo veličiny a_0 podle (3). Konkrétně místo E_n tak dostaneme $ZC^{-1}E_n$ a grafy funkcí ψ i ϱ zůstanou v platnosti pouze s jiným měřítkem (viz též obr. 1), tj. všechny délky je nutno vynásobit hodnotou C ze vztahu (6), všechny hodnoty ϱ hodnotou C^{-3} . Jinými slovy: všechny údaje o hustotách, uvedené pro vodík ($s M \rightarrow \infty$) v jednotkách ϱ_1 , jsou nyní správně vyjádřeny v jednotkách $\bar{\varrho}_1 = 10^{-5}(\bar{a}_0)^{-3}$. Na obrázcích se to týká legendy k šrafování i hodnot ϱ_{\max} . Záměnou $a_0 \rightarrow \bar{a}_0$ nejsou ovšem započítány relativistické opravy, Lambův posuv ani vliv magnetického momentu jádra a jeho konečného poloměru r_j . To je třeba mít na paměti zejména u těžkých atomů ($Z > 30$) a u „exotických“ soustav, o nichž se brzy zmíníme.

6. Zobecnění platnosti vrstevnicových grafů

Případ $\mu = m_e$, $Z > 1$ v rovnici (1) se týká jednoelektronových iontů He^+ , Li^{++} atd. Pro ně je $\mu_r \approx m_e$, a tedy $C \approx Z^{-1}$. Všechny lineární rozměry hustoty $\varrho(r)$ (např. poloměry kruhových vrstevnic na obrázcích stavů ns) se pro ion hélia zmenší dvakrát, hodnoty ϱ – např. ϱ_{\max} – naopak vzrostou osmkrát. Pro ion C^{5+} jsou příslušné koeficienty 6^{-1} a 216^*).

Pro $Z \approx 100$ by obdobný výpočet měl zdánlivě jen akademický význam, neboť s ionty jako U^{91+} se sotva setkáme, alespoň v pozemských podmínkách. Přitom je už třeba počítat s vlivem relativistických oprav, které s rostoucím Z prudce vzrůstají**) a dokonce i velikost jádra se stává nezanedbatelnou. Je-li totiž $R_{0,9}(1s)$ pro atom vodíku řádově 10^5 krát větší než poloměr jádra, pro ion U^{91+} je tento poměr jen asi $200 : 1$ a hustota $\varrho_{\max}(\text{U}) = 92^3 \varrho_{\max}(\text{H}) \doteq 7,8 \cdot 10^5 \varrho_{\max}(\text{H})$. (Připomeňme opět JMR.) Ve skutečnosti vrstevnicový graf stavu $1s$ v měřítku $\bar{a}_0 = a_0 : 92$ dává správný kvalitativní obraz slupky K v atomu uranu (vzhledem k stínění, viz [31], § 53). A vliv jádra se u těžších atomů měřitelně projevuje tzv. izotopovým posuvem – poloměr r_j totiž závisí i na počtu neutronů v jádře [33]. Jinými slovy, grafy hustot s modifikací délek podle (6) mají alespoň kvalitativně zajímavé aplikace i u těžších atomů.

Totéž platí, ale v výhradami naznačenými v 5. části, pro různé „exotické“ soustavy [24], [34], popisované rovnicí (1). Patří mezi ně už pozitronium, tj. vázaná soustava elektronu a pozitronu (zde $\mu = M = m_e$, $Z = 1$, a tedy $C = 2$), dále mezonové atomy se záporně nabitým mezonem μ nebo π místo elektronu ($C \ll 1$) apod. U těžších mezonových atomů nám dokonce může vyjít $\bar{a}_0 < r_j$, tj. mezon „obíhá“ z velké části uvnitř jádra. Pak je ovšem graf stavu $1s$ jen hrubým přiblížením, neboť analytické řešení rovnice (1) předpokládá $r_j \ll \bar{a}_0$. Zato jde o problém studovaný i experimentálně jako zdroj informace o rozložení kladného náboje v jádře [34].

7. Orbitály atomu vodíku a atomů (iontů) s více elektrony

Vlnové funkce atomu vodíku (2) jsou pro fyziku atomů a kvantovou chemii pouze základním východiskem. K popisu stavů atomu H můžeme jednak užít libovolné lineární kombinace těchto funkcí, jednak nás zajímá i popis elektronového obalu dalších atomů a iontů. Prakticky se užívá vždy popisu pomocí jednoelektronových vlnových funkcí $\psi_{n_i, l_i, m_i}(\mathbf{r}_i)$ – nebo opět jejich vhodných lineárních kombinací – pro elektrony očíslované indexem i (pro neutrální atom ${}_Z X$ je $i \doteq 1, \dots, Z$). Tyto funkce se získávají řešením Hartreeových nebo Hartreeových-Fockových rovnic nebo se různými způsoby aproximují. Klíčový význam řešení rovnice (1) vyplývá mj. z toho, že zmíněné vlnové funkce mají rovněž***) tvar (2); zde budeme raději psát

*) Přesněji, s uvážením redukované hmotnosti, $(6,000\,272)^{-1}$ a $216, 176$.

***) Např. vliv spin-orbitální interakce na hodnotu energie E_n je úměrný $Z^4 n^{-3}$ [32]).

****) Přesně vzato, tento závěr platí v přiblížení centrálního pole. Viz např. kap. IX v [24], kde se též pojednává o důsledcích nerozlišitelnosti elektronů v atomu. Zde tyto okolnosti pomíjíme.

$$(7) \quad \psi_{n_i l_i m_i}(r_i, \vartheta_i, \varphi_i) = R_{n_i l_i}^{a_i}(r_i) Y_{l_i m_i}(\vartheta_i, \varphi_i).$$

Úhlově závislá část Y v (7) a (2) je totiž shodná, radiální část nikoli a je pro různé atomy různá. Pro $Z \geq 2$ už nelze funkce R^{a_i} určit analyticky, v [19] aj. jsou uvedeny tabelárně.

Korektní zobrazení dalších atomů a iontů pomocí vrstevnicových grafů by předpokládalo užití funkcí (7), ať už v tabelární formě [19] nebo ve vhodném analytickém přiblížení. Nicméně o úhrnné elektronové hustotě $\varrho_{\text{tot}} = \sum_i \varrho_i$ v těžších atomech lze mnoho podstatného vyvodit už z poznatků o atomu vodíku. Některé závěry zde alespoň načrtne.

Užitím Unsöldova teorému (viz např. [3], str. 233)

$$(8) \quad \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} = \text{konst.}$$

Ize ukázat, že každá zaplněná slupka (K, L, M, ...) i podslupka ($1s^2, 2s^2, 2p^6, \dots$) v atomu nebo iontu je kulově symetrická a úhrnná hustota ϱ_{tot} v ní odpovídá přítomnosti $2(2l+1)$ elektronů v okolí jádra. Součinitel 2 před závorkou vyplývá ze spinu elektronu. Vrstevnicový graf pro takovou slupku nebo podslupku se tedy podobá grafům pro stavy ns na obr. 2–5, ovšem počet uzlů ($\varrho = 0$) a maxim může být jiný.*

Ze vztahu (8) plyne i kulová symetrie atomu vodíku (s jedním elektronem) v nepřítomnosti vnějších polí. Stav elektronu musíme pak popsat jako směs čistých stavů – např. np_x, np_y, np_z – z nichž každý přispívá k úhrnné hustotě stejnou váhou, zde konkrétně $\frac{1}{3}$. Na základě grafů v tomto článku je možno se o tom přímo přesvědčit sečtením příspěvků tří uvedených stavů v libovolném bodě v okolí jádra.***) Je to poznatek významný didakticky, protože fyzikálně myslící žák se může právem divit, proč se elektron ve stavu np orientuje v prostoru právě podél některé z os x, y, z . K tomu viz ještě [24], str. 649.

Uzavřené sférické slupky K, L ... jsou rozloženy poměrně těsně kolem jádra atomu. Proto pro elektron ve vnější, neuzavřené slupce v oblasti dále od jádra platí přibližně rovnice (1), v níž místo náboje jádra Ze vystupuje efektivní, odstíněný náboj $Z'e, Z' < Z$. Např. pro jediný valenční elektron ve stavu $3s$ (nebo v excitovaném stavu $4p$ atp.) atomu sodíku je prakticky $Z' = 1$. Daleko od jádra se tedy jeho vlnová funkce málo liší od funkce $3s$ ($4p, \dots$) atomu vodíku. Vrstevnicové grafy sestavené pro atom H poskytují tak alespoň kvalitativně správný obraz o hustotě ϱ_i elektronů ve vnějších slupkách ostatních atomů nebo iontů v oblasti daleko od jádra a tím o jejich možném chemickém

*) Je dán uzly a maximy funkce $(R_{n_i l_i}^{a_i})^2$, která má též počet uzlů a maxim jako $R_{n_i l_i}^2$, avšak pro jiné vzdálenosti r od jádra a s jinými hodnotami ϱ_{max} . Vlivem větší přitažlivosti náboje Ze jádra je funkce $R_{n_i l_i}^{a_i}$ více soustředěna kolem počátku. Proto „velikost“ atomů v základním stavu při $1 \leq Z \leq 92, \dots$ kolísá mnohem méně než „velikost“ atomu H při $l \leq n \leq 4, \dots$. S určením „poloměru“ atomu jsou však zásadní nesnáze [35]).

**) Tato myšlenka je též záslužně naznačena v [29], bohužel bez vztahu (8), takže je vlastně předkládána k věření, a s nekorektními grafy, takže zvidavý čtenář může být jen znejistěn, pokusí-li se ji ověřit.

chování. Hustoty ρ_i v blízkosti jádra a hodnoty energie $E_{n,l}$, těchto elektronů se ovšem od vodíkových mohou lišit značně.

Stacionární jednoelektronové vlnové funkce elektronu v atomu se v kvantové chemii obvykle nazývají atomové orbitály (AO). Jen výjimečně bývají tvaru (2) nebo (7), častěji jsou to příslušné reálné lineární kombinace np_x , np_y , atd. nebo různé funkce hybridní z nich vytvořené (viz např. [24], § 131 a doplněk F). Hybridní atomové orbitály umožňují jednoduše v prvním přiblížení popsat libovolné směrované vazby mezi atomy v molekulách vytvářením molekulových orbitálů (MO). Obrazný název hybridizace pochází od toho, že v hybridních AO vystupují vlnové funkce s různou hodnotou l , např. v známých tetraedrických orbitálech sp^3 funkce ns , np_x , np_y a np_z .

I hybridní atomové orbitály bývají v odborné literatuře zobrazovány stylizovaným způsobem (srov. část 4), který sice činí znázornění molekul přehlednějším, ale neodpovídá skutečné hustotě elektronů v prostoru. Kromě toho hybridizací pouze úhlových částí vlnových funkcí (jako v [24]) nelze o hustotě ρ získat zcela korektní obraz proto, že v hybridních AO vystupují různé radiální funkce (závisí totiž na l , viz (2), (7)). Na druhé straně i hybridní orbitály atomu vodíku ukazují lépe než kvalitativně chování vnějších elektronů dalších atomů a iontů tam, kde je z hlediska chemie zajímavé, tj. v oblasti dále od jádra. Nabízí se tedy rozšíření výsledků práce [25] i na hybridní orbitály, ať k demonstračním nebo výzkumným účelům. Avšak vzhledem k rozmanitosti chemických vazeb je počet různých atomových orbitálů vlastně neomezený, i často užívaných je mnoho [28]. Proto jsme místo přípravy obdobného dalšího článku volili jinou cestu: původní program z práce [25] byl upraven pro dostupnější počítač IQ 151 tak, aby zájemci z řad čtenářů mohli sami vytvářet vrstevnicové grafy hustot pravděpodobnosti pro libovolné hybridní orbitály atomu vodíku. Program s komentářem, přizpůsobený minigrafu Aritma 0507 z r. 1985, je na požádání k dispozici na adrese pražské spoluautorky tohoto článku (Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2).

8. Závěr

Začali jsme připomínkou jedné ze základních Schrödingerových prací, v níž bylo už r. 1926 podáno řešení rovnice (1) pro atom vodíku. Viděli jsme, že tímto základním krokem se ovšem fyzika elektronového obalu atomů nezastavila; platí to dokonce i o atomu vodíku samotném.*) Doufáme, že čtenáře v našem článku zaujal některý z dokladů o pozdějším vývoji, o němž se v kursech kvantové mechaniky – alespoň pro nespecialisty – málo hovoří.

Nicméně nerelativistické řešení rovnice (1) je a zůstává základním východiskem pochopení elektronového obalu z hlediska kvantové fyziky a kvantové chemie. Jednou ze složek tohoto pochopení je jeho názorná stránka, na níž jsme se zejména soustředili.

*) Ještě bohatší historii má teoretický a experimentální výzkum spektra atomu vodíku, jak z našich novějších pramenů ukazuje např. tab. 95 v [3]. Pozoruhodný je mj. pokrok v rozlišování jednotlivých čar jemné struktury spektra laserovými metodami, které byly rozvinuty teprve v sedmdesátých letech [37].

Vytváření korektních názorných představ o atomech je patrně tím významnější, čím nižším věkovým skupinám žáků se učivo o atomech zprostředkuje. Práce [25] i tento článek byly proto zamýšleny jako pomoc středoškolským učitelům chemie a fyziky.

Přesvědčivosti výkladu ve fyzice jistě velmi napomáhají názorné pokusy. Podobně u teoretických poznatků je přínosem, ověřují-li si žáci samostatně platnost sdělovaných tvrzení. Proto pokládáme za důležité ilustrovat názornou stránku učiva o atomech takovými obrázky, které nejsou v rozporu navzájem (jako obr. 45 a 47 v [14]) ani s výkladem a na nichž si žák může ověřit vše, co jeho stupni poznání odpovídá.

Tento článek byl původně chystán – s názvem „Orbit, orbital, orbitála“ [35] – spíše v polemickém nebo ujasňovacím pojetí v situaci, kdy experimentální učebnice pro gymnázia slibovaly podstatné rozšíření látky z kvantové fyziky (viz např. [38]) a zároveň se kolem pojmu orbitálu vynořovaly různé nejasnosti*). Nyní většina polemických podnětů odpadla. Výklad o elektronovém obalu atomů v nyní užívané učebnici chemie [40] je korektní a přiměřený, pouze se v duchu tehdejšího kvantového optimismu odvolává na budoucí hlubší výklad o atomech ve fyzice. Ústup kvantové tematiky je po zkušenostech s experimentálními učebnicemi z hlediska školy zdůvodněný. Není však potěšující z hlediska vědy a jejího náležitého místa v naší společnosti. Není pochyb o potřebě důkladné přípravy jakkoli pojatého rozsáhlejšího výkladu moderních témat ve školské fyzice. Náš článek je míněn jako jeden z příspěvků a podnětů k takové přípravě. Doufáme, že zároveň i program pro počítač IQ 151 najde v této souvislosti kladnou odezvu.

Nakonec bychom rádi aspoň na tomto místě poděkovali doc. J. Obržálkovi z katedry matematické fyziky MFF UK v Praze za jeho tehdejší pomoc při vzniku práce [25].

Dodatek

V práci [25] i v legendě k našim obrázkům je pro reálné kombinace vlnových funkcí atomu vodíku užito značení

$$\psi_{nl}^{(1)} = 2^{-1/2}[-\psi_{n,l,1} + \psi_{n,l,-1}] - \text{obr. 8 a 12,}$$

$$\psi_{nl}^{(2)} = 2^{-1/2}[\psi_{n,l,2} + \psi_{n,l,-2}] - \text{obr. 16 a 20.}$$

*) Týkaly se zobrazování, názvu i definice orbitálu. Lze doložit výrazy orbit [3], orbital, orbitál (ve slovenštině [29]) i orbitála [24] a i češtině lépe odpovídá koncovka -ál jako v ostatních českých slovech příbuzného původu [39]. K velmi problematické definici orbitálu jako jisté části prostoru viz např. [35], str. 273.

Literatura

- [1] SCHRÖDINGER, E.: *Ann. Phys.* 79 (1926), 361.
- [2] ŠPOLSKIJ, E. V.: *Atomová fyzika II*. Praha, SNTL, 2. vyd. 1958.
- [3] BEISER, A.: *Úvod do moderní fyziky*. Praha, Academia 1974, 1978.
- [4] WHITE, H. E.: *Introduction to Atomic Spectra*. New York, McGraw-Hill 1934.
- [5] FISCHER, J.: *Průhledy do mikrokosmu*. Praha, Mladá fronta 1986.
- [6] HEITLER W., LONDON, F.: *Z. Phys.* 44 (1927), 455.
- [7] HARTREE, D. R.: *Proc. Roy. Soc.* 24 (1928), 111.
- [8] FOCK, V.: *Z. Physik* 61 (1930), 126 a 62 (1930), 795.
- [9] FREI, V.: *MFvŠ* 8 (1977/78), č. 2, 145.
- [10] BLOCHINCEV, D. I.: *Základy kvantové mechaniky*. Praha, NČSAV 1956.
- [11] PIŠŮT, J., GOMOLČÁK, L., ČERNÝ V.: *Úvod do kvantové mechaniky*. Bratislava, Alfa—Praha, SNTL 1983.
- [12] FORMÁNEK, J.: *Úvod do kvantové teorie*. Praha, Academia 1983.
- [13] MATTHEWS, P. T.: *Základy kvantové mechaniky*. Praha; SNTL 1976.
- [14] FUKA, J.: *Doplňek k učivu fyziky pro IV. ročník gymnasia*. Praha, SPN 1974.
- [15] *Encyklopedie vědy a techniky*. Praha, Albatros 1986.
- [16] *Svět čísel, atomů a molekul*. Praha, Albatros 1986.
- [17] OPAVA, Z.: *Chemie kolem nás*. Praha, Albatros 1986.
- [18] KNOX, R. S.: *Solid State Physics* 4 (1957), 413.
- [19] HERMAN, F., SKILLMAN S.: *Atomic Structure Calculations*. Englewood Cliffs, New Jersey, Prentice Hall 1963.
- [20] GOLEBIEWSKI, A.: *Elementy mechaniki i chemii kwantowej*. Varšava, PWN 1982.
- [21] KITTEL, CH.: *Úvod do fyziky pevných látek*. Praha, Academia 1985.
- [22] FREI, V.: *Fyzika pevných látek*. Praha, SPN 1978, 1980, obr. 3—8 i 2—4, 5—2.
- [23] COPPENS, P., STEVENS, E. D.: *Advances in Quantum Chemistry* 10 (1977), 1.
- [24] DAVYDOV, A. S.: *Kvantová mechanika*. Praha, SPN 1978.
- [25] PIHERA, V.: *Názorné prvky ve výkladu kvantové mechaniky*. Diplomová práce MFF UK. Praha 1981.
- [26] BRICKMAN, J., KLÖFFLER, M., RAAB, H. U.: *Chemie in unserer Zeit* 12 (1978), 23.
- [27] BRANDT, S., DAHMEN D.: *The Picture Book of Quantum Mechanics*. New York, Wiley 1985.
- [28] BALLHAUSEN, C. J., GRAY, H. B.: *Molecular Orbital Theory*. New York—Amsterdam, Benjamin 1965.
- [29] VANOVIČ, J.: *Atómová fyzika*. Bratislava, Alfa—Praha, SNTL 1980, 206, 255—256.
- [30] FREI, V.: *MFvŠ* 13 (1982/83), č. 2, 122.
- [31] LANDAU, L. D., LIŠIČ, J. M.: *Kvantová mechanika. (Úvod do teoretické fyziky 2.)* Bratislava, Alfa—Moskva, Mir 1982.
- [32] BETHE, H. A., SALPETER, E. E.: *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*. Berlin—Göttingen—Heidelberg, Springer 1957 (rus. překlad Moskva, Fizmatgiz 1960).
- [33] ATKINS, M.: *Quanta. Handbook of Conceptions*. Oxford, Clarendon Press 1974 (rus. překlad Moskva, Mir 1977).
- [34] PIŠŮT, J., ZAJAC, R.: *O atómech a kvantování*. Bratislava, Alfa 1983.
- [35] FREI, V.: *MFvŠ* 13 (1982/83), č. 4, 269.
- [36] BROŽ, J., ROSKOVEC, V., VALOUCH, M.: *Fyzikální a matematické tabulky*. Praha, SNTL 1980.
- [37] HÄNSCH, T. W., SCHAWLOW, A. L., SERIES, G. W.: *Scientific American* 1979, March, 72.
- [38] LEHOTSKÝ, D. a kol.: *Fyzika. Experimentální učebnice pro 4. ročník gymnázií*. Praha, SPN 1982.
- [39] JENŠOVSKÝ, L.: soukromé sdělení.
- [40] VACÍK, J. a kol.: *Chemie pro I. ročník gymnázií*. Praha, SPN 1984.