

učební texty Univerzity Karlovy

Jiří Beneš  
Daniel Jirák  
František Vítek

# ZÁKLADY LÉKAŘSKÉ FYZIKY

PÁTÉ VYDÁNÍ

KAROLINUM

# Základy lékařské fyziky

Jiří Beneš, Daniel Jirák, František Vítek

---

Recenzovali:

Ing. Milan Hájek

doc. RNDr. Otakar Jelínek, CSc.



**Financováno  
Evropskou unií**  
NextGenerationEU



Publikace byla vydána za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy a Národního plánu obnovy v rámci projektu Transformace pro VŠ na UK (reg. č. NPO\_UK\_MSMT-16602/2022).

Vydala Univerzita Karlova  
Nakladatelství Karolinum  
Praha 2022  
Redakce Jana Jindrová  
Sazba a zlom Stará škola (staraskola.net)  
Páté, přepracované a rozšířené vydání

© Univerzita Karlova, 2022  
© Jiří Beneš, Daniel Jirák, František Vítek

ISBN 978-80-246-5398-3  
ISBN 978-80-246-5427-0 (pdf)



Univerzita Karlova  
Nakladatelství Karolinum

[www.karolinum.cz](http://www.karolinum.cz)  
[ebooks@karolinum.cz](mailto:ebooks@karolinum.cz)



# OBSAH

<b>1. STAVBA HMOTY</b> .....	11
1.1 Elementární částice, formy hmoty .....	11
1.2 Energie .....	15
1.3 Kvantové jevy .....	17
1.3.1 Kvantová čísla .....	19
1.4 Atom vodíku .....	21
1.4.1 Spektrum atomu vodíku .....	23
1.5 Struktura elektronového obalu těžších atomů .....	24
1.6 Excitace, emise a ionizace, vazebná energie elektronu .....	25
1.7 Vlnově mechanický model atomu .....	28
1.8 Jádro atomu .....	29
1.8.1 Vazebná energie jádra .....	30
1.8.2 Magnetické vlastnosti jader .....	32
1.9 Síly působící mezi atomy .....	33
1.9.1 Iontová vazba .....	34
1.9.2 Kovalentní vazba .....	35
1.10 Hmotnostní spektrometrie .....	36
<b>2. MOLEKULÁRNÍ BIOFYZIKA</b> .....	40
2.1 Náplň molekulární biofyziky .....	40
2.2 Síly působící mezi molekulami .....	41
2.3 Skupenské stavy hmoty .....	41
2.3.1 Plyny .....	42
2.3.2 Kapaliny .....	45
2.3.3 Tuhé látky .....	46
2.3.4 Skupenství plazmatické .....	47
2.3.5 Změny skupenství .....	48
2.4 Disperzní systémy .....	49
2.4.1 Gibbsův zákon fází .....	49
2.4.2 Klasifikace disperzních systémů .....	51
2.4.3 Analytické disperze .....	52
2.4.4 Koloidní disperze .....	55
2.5 Voda jako rozpouštědlo .....	64
2.5.1 Polární chování vody .....	64
2.5.2 Ostatní fyzikální vlastnosti vody .....	65
2.5.3 Těžká voda .....	66
2.5.4 Voda v organismu .....	66
2.6 Transportní jevy .....	67
2.6.1 Viskozita .....	67

2.6.2	Difuze	69
2.6.3	Vedení tepla	71
2.7	Koligativní vlastnosti roztoků	71
2.7.1	Snížení tenze par	72
2.7.2	Zvýšení bodu varu – ebulioskopie	72
2.7.3	Snížení bodu tuhnutí – kryoskopie	73
2.7.4	Osmotický tlak	73
2.8	Jevy na rozhraní fází	76
2.8.1	Povrchové napětí	76
2.8.2	Adsorpce	76
<b>3.</b>	<b>BIOENERGETIKA A TERMODYNAMIKA V LÉKAŘSTVÍ</b>	<b>78</b>
3.1	Základní pojmy a definice	78
3.1.1	Základní termodynamické pojmy	79
3.1.2	Práce a teplo	81
3.1.3	Stavové funkce	81
3.1.4	Chemický potenciál	86
3.1.5	Měrná tepelná kapacita	87
3.2	Termodynamika živých systémů	88
3.3	Transformace a akumulace energie v živých systémech	90
3.3.1	Tepelné ztráty	91
3.4	Význam termodynamiky pro transport membránami	92
3.4.1	Prostá difuze	92
3.4.2	Elektrodifuze iontů	92
3.4.3	Přestup iontovými kanály	93
3.4.4	Pasivní zprostředkovaný transport	93
3.4.5	Aktivní transport	93
3.4.6	Skupinový přenos	95
3.4.7	Endocytóza a exocytóza	95
3.5	Léčebné užití tepla	96
3.6	Měření a regulace teploty	96
3.6.1	Kapalinové teploměry	97
3.6.2	Regulace teploty	98
3.7	Tepelná zařízení	99
3.7.1	Termostaty	99
3.7.2	Sterilizátory a autoklávy	99
3.7.3	Vodní lázně	99
3.7.4	Temperované operační stoly	100
3.7.5	Chladicí zařízení	100
<b>4.</b>	<b>BIOFYZIKA ELEKTRICKÝCH PROJEVŮ A ÚČINKŮ, ELEKTRICKÉ METODY</b>	<b>101</b>
4.1	Základní pojmy a definice	101
4.1.1	Coulombův zákon, permitivita látek a hydratace	102
4.1.2	Elektrický potenciál, potenciály na fázovém rozhraní	103
4.2	Elektrické projevy v živém organismu	105
4.2.1	Klidový membránový potenciál buňky	106
4.2.2	Akční potenciál nervového vlákna	107
4.2.3	Potenciály na ostatních biologických membránách	110
4.3	Použití elektřiny v lékařské diagnostice	113
4.3.1	Elektrokardiografie	114
4.3.2	Ostatní metody	117
4.4	Elektrický proud	117
4.4.1	Vedení proudu v organismu	118
4.4.2	Účinky různých druhů proudu na organismus	120

4.5	Využití elektřiny v terapii	122
4.5.1	Galvanoterapie	122
4.5.2	Elektroléčba střídavými a přerušovanými proudy	122
4.5.3	Elektrostimulace	122
4.5.4	Defibrilace	123
4.5.5	Vysokofrekvenční terapie	123
4.5.6	Elektrochirurgie	124
4.6	Měření elektrických veličin	125
4.6.1	Měření elektrického napětí	125
4.6.2	Měření elektrického proudu	127
4.6.3	Měření elektrického odporu	128
4.6.4	Osciloskop	130
4.7	Elektrické fyzikálně-chemické metody, definice pH	131
4.7.1	Potenciometrie	131
4.7.2	Konduktometrie	135
<b>5.</b>	<b>MAGNETISMUS</b>	137
5.1	Magnetická indukce a magnetický indukční tok	139
5.2	Silové působení magnetického pole	140
5.3	Magnetický moment a magnetizace	142
5.4	Interakce magnetických polí s biologickými objekty	143
<b>6.</b>	<b>BIOMECHANIKA</b>	144
6.1	Mechanické vlastnosti tkání	144
6.1.1	Deformace kostí	145
6.1.2	Deformace měkkých tkání	145
6.2	Biofyzika svalů	147
6.3	Mechanická práce srdce	148
6.4	Biofyzika krevního oběhu	149
6.5	Krevní tlak a jeho měření	156
6.6	Biofyzika dýchání	157
<b>7.</b>	<b>BIOAKUSTIKA</b>	161
7.1	Základní pojmy a veličiny	161
7.2	Dopplerův jev	167
7.3	Vztah mezi podnětem a počítkem	168
7.4	Sluchové pole	169
7.5	Spektrum zvuku	172
7.6	Biofyzika slyšení	174
7.7	Teorie slyšení	176
7.8	Bioelektrické projevy vnitřního ucha	176
7.9	Akustika hlasu a řeči	178
7.10	Výšetření sluchu	178
7.11	Ultrazvuk	180
7.11.1	Fyzikální vlastnosti ultrazvukových vln	182
7.11.2	Účinky ultrazvuku	184
7.11.3	Terapeutické využití ultrazvuku	185
7.11.4	Využití akustické energie rázové vlny v terapii	186
<b>8.</b>	<b>FYZIKÁLNÍ ZÁKLADY POUŽITÍ OPTIKY V LÉKAŘSTVÍ</b>	188
8.1	Světlo	188
8.1.1	Záření látek	190
8.1.2	Zdroje světla	192
8.1.3	Fotometrie	197

8.2	Interakce světla s prostředím	198
8.2.1	Fermatův princip	199
8.2.2	Disperze světla	200
8.2.3	Rozptyl světla	201
8.2.4	Absorpce světla	205
8.2.5	Polarizace světla	206
8.3	Vlnová optika	207
8.3.1	Interference světla	208
8.3.2	Ohyb světla	208
8.4	Optické zobrazování	210
8.4.1	Zobrazení odrazem	211
8.4.2	Zobrazení lomem	211
8.5	Optické přístroje a metody	213
8.5.1	Lupa	213
8.5.2	Optický mikroskop	213
8.5.3	Elektronový mikroskop	216
8.5.4	Endoskopie a klinické využití	218
8.5.5	Absorpční fotometrie	220
8.5.6	Spektrální fotometrie	221
8.5.7	Spektrální analýza	221
8.5.8	Refraktometrie	222
8.5.9	Polarimetrie	222
8.6	Účinek různých druhů světla na organismus	223
8.6.1	Infračervené záření	223
8.6.2	Viditelné světlo	224
8.6.3	Ultrafialové záření	224
8.7	Optika lidského oka	225
8.7.1	Hlavní optické části oka	225
8.7.2	Zraková ostrost	226
8.8	Biofyzika vidění	227
8.8.1	Struktura sítnice	228
8.8.2	Citlivost a adaptace oka	230
8.8.3	Biofyzika čípků	231
8.9	Refrakční vady oka	231
8.9.1	Sférická ametropie	232
8.9.2	Astigmatismus (ametropie asférická)	233
8.9.3	Akomodace oka	234
8.10	Korekce očních vad	234
<b>9.</b>	<b>FYZIKÁLNÍ ZÁKLADY POUŽITÍ RENTGENOVÉHO ZÁŘENÍ V LÉKAŘSTVÍ</b>	<b>236</b>
9.1	Charakteristika rentgenového záření	236
9.1.1	Brzdné rentgenové záření	237
9.1.2	Charakteristické rentgenové záření	239
9.1.3	Rentgenový přístroj	240
9.1.4	Absorpce rentgenového záření	243
9.2	Použití rentgenového záření v medicíně	245
9.3	Ochrana před rentgenovým zářením	248
<b>10.</b>	<b>RADIOAKTIVITA A IONIZUJÍCÍ ZÁŘENÍ</b>	<b>250</b>
10.1	Přirozená a umělá radioaktivita	251
10.1.1	Radioaktivní rozpad	251
10.1.2	Radioaktivní rovnováha	254
10.1.3	Radioaktivní řady	257
10.1.4	Druhy radioaktivního rozpadu	257



10.2	Zdroje ionizujícího záření	265
10.2.1	Kladně nabitě částice	265
10.2.2	Záporně nabitě částice – elektrony	268
10.2.3	Neutrony	269
10.2.4	Fotony záření $\gamma$	270
10.3	Interakce záření s hmotou	270
10.3.1	Interakce záření $\alpha$	271
10.3.2	Interakce záření $\beta$	272
10.3.3	Interakce záření $\gamma$	273
10.3.4	Interakce neutronů	278
10.4	Detekce ionizujícího záření	280
10.4.1	Ionizační komory	280
10.4.2	Geigerovy–Müllerovy počítače	282
10.4.3	Scintilační počítače	284
10.4.4	Měření aktivity <i>in vitro</i>	285
10.4.5	Měření aktivity <i>in vivo</i>	286
10.5	Základní dozimetrické veličiny	288
10.5.1	Biologické účinky ionizujícího záření	290
10.5.2	Osobní dozimetrie	292
10.6	Leksellův gama nůž	293
<b>11.</b>	<b>ZÁKLADNÍ ZOBRAZOVACÍ METODY V MEDICÍNĚ</b>	<b>295</b>
11.1	Použití rentgenového záření v zobrazování	295
11.1.1	Kontrast v rentgenových snímcích	297
11.1.2	Rentgen a výpočetní tomografie	301
11.2	Ultrazvukové zobrazování	310
11.2.1	Generování mechanického vlnění	311
11.2.2	Diagnostický ultrazvuk	312
11.2.3	Ultrazvukový obraz	313
11.2.4	Části ultrazvukového přístroje	315
11.3	Optoakustické zobrazování	316
11.4	Optické (bioluminiscenční a fluorescenční) zobrazování	318
11.4.1	Bioluminiscenční zobrazování	319
11.4.2	Fluorescenční zobrazování	320
11.5	Magnetická rezonance – zobrazování a spektroskopie	321
11.5.1	Princip magnetické rezonance	322
11.5.2	Jev magnetické rezonance	323
11.5.3	Relaxační procesy	326
11.5.4	Konstrukce MR obrazu	331
11.5.5	MR zobrazovací sekvence	333
11.5.6	Části MR tomografu	334
11.5.7	Magnetická rezonanční spektroskopie	335
11.6	Zobrazovací metody v nukleární medicíně	339
11.6.1	Radionuklidy	339
11.6.2	Gama-kamera	340
11.6.3	Scintigrafie	340
11.6.4	Jednofotonová emisní tomografie	342
11.6.5	Pozitronová emisní tomografie	343
	<b>LITERATURA</b>	<b>348</b>
	<b>SUMMARY</b>	<b>349</b>



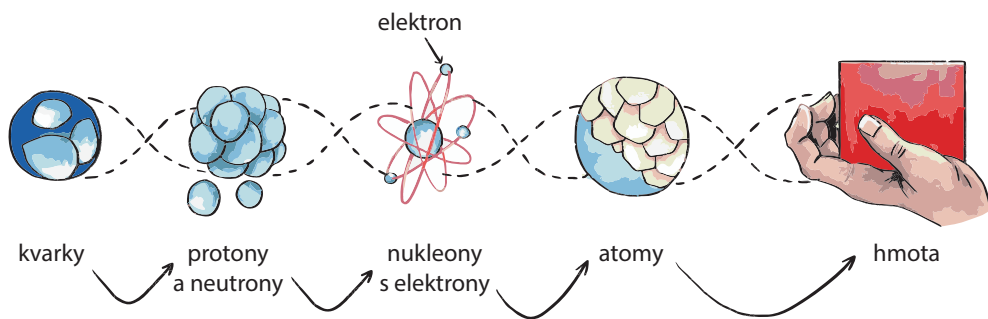
# 1. STAVBA HMOTY

*Studium elementárních částic a jejich chování nám umožňuje pochopit řadu jevů, které využíváme v moderní medicíně. Díky znalostem atomové a jaderné fyziky můžeme využívat některé částice, jako jsou například pozitrony, pro diagnostické nebo terapeutické účely. Některé jevy lze dobře vysvětlit pouze pomocí kvantové fyziky, proto se v této úvodní kapitole musíme zmínit také o této tolik zajímavé části fyziky i za cenu jejího výrazného zjednodušení.*

*Při studiu atomů se budeme věnovat zejména atomu vodíku. Podle odhadů jádra atomů vodíku tvoří více než 90 % všech atomů ve vesmíru. Elementární vodík se na Zemi vyskytuje jen vzácně, je ale přítomen ve všech organických sloučeninách. Sloučeniny tvořené jednotlivými atomy vznikají na základě působení různých chemických vazeb. Proto se chemickými vazbami budeme zabývat v závěru této kapitoly.*

## 1.1 ELEMENTÁRNÍ ČÁSTICE, FORMY HMOTY

Hmota tvoří náš vesmír, je to látka, ze které jsou složeny veškeré objekty. Jednotlivé objekty sestávají ze základních stavebních prvků, které nelze dále chemicky dělit. Nejmenší částicí prvku, zachovávající si všechny jeho chemické vlastnosti, je atom. Atom má vnitřní strukturu; je tvořen jádrem (o průměru řádově  $10^{-15}$  m) a obalem (o průměru řádově  $10^{-10}$  m). Obal atomu je tvořen záporně nabitými **elektrony**, které se vyskytují kolem jádra pouze po určitých dráhách, tzv. orbitalech, daných elektronovou konfigurací. Tyto jednotlivé energetické hladiny vznikají jako důsledek potenciální energie elektronů v přítomnosti atomového jádra a dalších elektronů. Jádro, ve kterém je soustředěna takřka celá hmotnost atomu, je tvořeno **nukleony**, což jsou kladně nabitě **protony** a elektricky neutrální **neutrony**. Nukleony se dále skládají z **kvarků**, které nemají vnitřní strukturu a patří tak mezi nejmenší známé částice. Obrázek 1.1 schematicky ukazuje, jak se hmota postupně skládá z jednodušších objektů až po nejmenší částice. Existují tři způsoby vzniku (generace) kvarků; rozlišujeme je podle vlastností, kterým se říká vůně. V každé generaci jsou podle této vlastnosti dva kvarky: v první generaci jsou označovány **u** (up) a **d** (down), kvarky druhé generace jsou **c** (charm) a **s** (strangeness) a ve třetí generaci jsou to kvarky **b** (bottom) a **t** (top). Proton je složen z kvarků **uud**, neutron je složen z kvarků **udd**.



**Obr. 1.1** Hmota se skládá z jednodušších objektů až po nejmenší částice

Každá částice má charakteristické vlastnosti, jako je např. klidová hmotnost, elektrický náboj nebo spin. Velikost náboje protonů a elektronů je  $1,602 \cdot 10^{-19}$  C. Spin je vlastní moment hybnosti elementárních částic způsobený jejich rotací a podle jeho hodnoty můžeme elementární částice dělit do dvou velkých skupin. První představují **fermiony**, které jsou charakterizovány neceločíselným spinem a jejich chování se dá popsat tzv. Fermiho–Diracovou statistikou. Mezi fermiony patří například nukleony a elektrony. Jejich základní vlastností je, že se chovají podle tzv. Pauliho vylučovacího principu, tj. nemohou existovat současně na stejném místě dva fermiony s úplně totožnou energetickou charakteristikou. To např. vysvětluje, proč se všechny elektrony v atomu nenacházejí v nejnižší energetické hladině, ale s rostoucí hodnotou náboje jádra postupně zaplňují i vyšší energetické hladiny, které jsou vzdálenější od jádra atomu. Druhá skupina, **bosony**, má spin celočíselný a jejich chování je popsáno Einsteinovou–Boseovou statistikou. Mezi bosony patří například **foton**. Pro bosony je typické, že ve stejné energetické úrovni se může vyskytovat neomezené množství těchto částic. To je např. příčinou supratekutosti helia při velmi nízkých teplotách (spin atomu helia, přesněji izotopu  $^4\text{He}$ , je nulový).

Elementární částice můžeme rozdělit také podle velikosti klidové hmotnosti. Částice s nulovou klidovou hmotností jsou **fotony**, **gluony** a teoreticky předpovězené **gravitony**. **Leptony** jsou lehké částice s malou klidovou hmotností, na které nepůsobí silná interakce. Sem patří např. *elektrony*, *pozitrony*, *neutrino*, *miony* a *tauony* a samozřejmě jejich antičástice. Pro leptony je charakteristické, že podle současných znalostí nemají vnitřní strukturu a podléhají slabé interakci, leptony obsahující náboj také elektromagnetické. Částice se střední klidovou hmotností se nazývají **mezony** (např. mezon m, mezon p). **Baryony** jsou těžké částice, kam obecně patří nukleony a jejich příslušné antičástice. Mezony a baryony se nazývají **hadrony**.

### ► Zajímavost 1.1

Všechny leptony včetně elektricky nenabitých neutrin interagují se slabou interakcí. Neutrino jsou stabilní částice – nepodléhají samovolnému rozpadu a interagují s hmotou velice slabě; proto je velmi obtížné je detekovat. Přesto je jich v našem okolí velké množství, jedná se např. o sluneční neutrino, reliktní neutrino, která pocházejí z období oddělení neutrin od ostatní hmoty v době 1 s po Velkém třesku, nebo atmosférická neutrino vznikající 20 km na zemi při interakci kosmického záření s atmosférou. Z umělých zdrojů stojí za zmínku jaderné elektrárny, které produkují každou sekundu běžně přes 50 000 neutrin. Odhaduje se, že u Země je

tok slunečních neutrin  $70 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ , které naší planetou proletí bez interakce (ta je zcela výjimečná).

Neutrino poprvé předpověděl Wolfgang Pauli roku 1931, kdy vysvětlil rozpad neutronu na proton a elektron – beta rozpad, o kterém pojednává kapitola 9. Trvalo 25 let od vyslovení hypotézy o existenci neutrin k jejímu experimentálnímu ověření – roku 1956 byl v časopise Science publikován článek o detekci neutrin. Za tento výzkum Clyde Cowan a Frederick Reines obdrželi později Nobelovu cenou za fyziku.

**Antičástice** existuje ke každé částici, její některé základní vlastnosti jsou uvedeny v tabulce 1.1. Například *pozitron* je antičástice elektronu, *antiproton* je antičástice protonu. Pokud částice s antičásticí interagují, dojde k jejich zániku (tzv. anihilaci) a vznikají jiné částice.

Podle fyzikální podstaty rozdělujeme částice na látkové (neboli fermiony) a polní (neboli bosony). První skupinu představují částice, jejichž klidová hmotnost je vždy nenulová. To znamená, že nemohou dosáhnout rychlosti světla. Naopak polní částice mohou mít i nulovou hmotnost a pohybovat se rychlostí světla (např. foton). Podle charakteru elementárních částic rozdělujeme také hmotu na formu látkovou a polní.

**Tab. 1.1** Vybrané základní charakteristiky antičástice

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Stejná hmotnost jako částice</li><li>• Stejná hodnota spinu (celočíslný, neceločíslný), ale s opačnou točivostí (levotočivý nebo pravotočivý)</li><li>• Opačný magnetický moment (kladný nebo záporný)</li><li>• Opačný náboj (kladný nebo záporný) – není-li částice elektroneutrální, a pokud je magnetický moment poločíslný</li></ul> |
|---|

Látková forma se vyskytuje typicky ve třech různých skupenstvích, a to pevném, kapalném a plynném. Nyní se k nim přidává i plazma (ionizovaný plyn), které je nejrozšířenější formou látky ve vesmíru. Vlastnosti fyzikálních polí můžeme popisovat pomocí fyzikálních veličin. Pro formu polní je charakteristické vzájemné silové působení zdrojů jednotlivých druhů fyzikálních polí, která jsou ve fyzice známa čtyři: gravitační, elektromagnetické a dvě pole jaderná, silné a slabé. Jestliže silové působení v silném jaderném poli budeme považovat za jednotkové, potom elektromagnetická interakce je přibližně  $10^{-2}$ krát slabší, relativní síla slabé jaderné interakce je  $10^{-13}$  a nejslabší interakce, gravitační, vykazuje relativní sílu rovnou  $10^{-38}$ . Důležitou charakteristikou silového působení je jeho dosah. Zatímco působení gravitačního a elektromagnetického pole je neomezené a kvadraticky klesá se vzdáleností, slabá a silná interakce působí pouze v bezprostředním okolí elementárních částic. V případě silné interakce je dosah přibližně  $10^{-15}$  m, v případě interakce slabé je to  $10^{-18}$  m.

Silná interakce působí jen na hadrony. Tato síla udržuje např. pohromadě neutrony a protony v atomovém jádře. Elektromagnetická interakce působí pouze na částice s elektrickým nábojem. Její síla  $|\mathbf{F}| = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B}$  je zprostředkována elektromagnetickými poli složenými z elektrického pole  $\vec{E}$  (produkovaného stacionárními elektrickými náboji) a magnetického pole  $\vec{B}$  (produkovaného pohybujícími se náboji – tedy elektrickými proudy). Elektrickou část pole lze kvantitativně popsat Coulombovým zákonem a magnetickou část Lorentzovou silou. Slabá interakce působí na všechny leptony a kvarky. Tato interakce např. vysvětluje

beta rozpad popsaný v kapitole 9, který je principiální pro pochopení pozitronové emisní tomografie používané pro diagnostické účely (je popsána v kap. 11). Gravitační interakce působí na všechny částice. Pohyby planet nebo např. soudržnost galaxií jsou určeny právě gravitační silou.

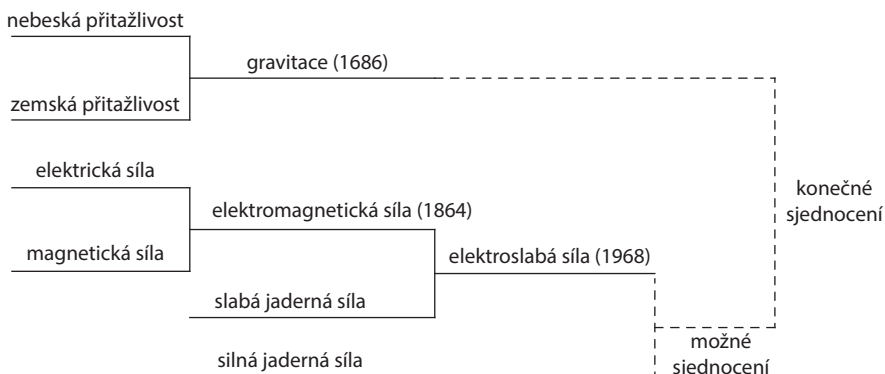
Jednotlivé formy hmoty mohou v sebe vzájemně přecházet. Typickým příkladem přechodu formy látkové na formu pole je vznik elektromagnetického záření při anihilaci částice s antičásticí. Opačným příkladem je vznik elektron–pozitronového páru při interakcích dostatečně energetického elektromagnetického záření s látkou. Označení forma látková a forma pole se používá spíše v makrosvětě, zatímco v mikrosvětě (atomární úroveň) se pro první formu hmoty používá výraz forma částicová (korpuskulární) a pro druhou formu výraz interakce. Silové působení všech druhů polí má výměnný charakter, což znamená, že je zprostředkováno výměnou kvant těchto polí. Nejdéle známým kvantem je foton, kvantum pole elektromagnetického. Kvanta silného jaderného pole se nazývají **gluony**, pro slabé pole jaderné jsou kvanta představována tzv. **intermediárními bosony** a konečně pro interakci gravitační je kvantem tzv. **graviton**. To je částice hypotetická, která zatím nebyla experimentálně prokázána. Pojem pole v tomto případě znamená oblak intermediálních částic, které zprostředkovávají interakci. Každá elektricky nabitá částice je tedy obklopena fotony, každý kvark gluony apod.

### ► Zajímavost 1.2

Dr. Murray Gell-Mann se svým kolegou Georgem Zweigem vyslovili v roce 1964 hypotézu, že všechny známé částice lze poskládat z pouhých tří fundamentálních částic (případně jejich antičástic). Gell-Mann dal těmto základním částicím záhadné jméno kvarky. Slovo kvark poprvé najdeme v románu plném slovních hříček irského spisovatele Jamese Joyce Plačky za Finnegana (Finnegan's Wake) ve spojení „three quarks for Muster Mark“ (česky asi „tři kvarky pro pana Marka“).

Revoluční na této hypotéze (oceněné Nobelovou cenou) bylo, že předpovídala pro kvarky elektrický náboj  $2/3$  (kvarky u, c, t) nebo  $-1/3$  (kvarky d, s, b) náboje protonu. Takové zlomkové hodnoty náboje ovšem nebyly dříve nikdy pozorovány, všechny běžné částice mají náboj celočíselný. Pozdější experimentální práce nakonec dokázaly existenci kvarků; poslední, šestý typ kvarku byl objeven v roce 1995. V přírodě dosud nikdo nepozoroval jednotlivý kvark, tyto částice se pravděpodobně mohou vyskytovat pouze ve vázaných soustavách. Stejně jako leptony, i kvarky jsou charakterizované také spinem – jeho hodnota je  $\pm 1/2$ . Kvarky vytvářejí složené částice nazývané hadrony, a to takovým způsobem, že součet elektrických nábojů jednotlivých kvarků v hadronu je vždy celé číslo.

Ukazuje se, že rozšiřující se poznání vlastností přírody dospělo k sjednocování jednotlivých druhů popisovaných fyzikálních polí. Nejdříve byl spojen popis pole magnetického a elektrického, později došlo k sjednocení popisu pole elektromagnetického a slabého pole jaderného. V současné době existují teorie, které zahrnují i sloučení silného pole jaderného s polem elektroslabým, a konečným cílem je najít tzv. **teorii velkého sjednocení**, kde lze všechna fyzikální pole popsat jediným způsobem, jediným systémem rovnic (obr. 1.2). Teorii nejvíce přijímanou odbornou veřejností je v současné době Standardní model částicové fyziky, protože je konzistentní jak s kvantovou mechanikou, tak i se speciální teorií relativity. Tento model popisuje silnou, slabou a elektromagnetickou interakci a elementární částice, které tvoří veškerou hmotu. Tato teorie říká, že veškerá známá hmota ve vesmíru se skládá ze šesti druhů kvarků a šesti druhů leptonů (a jejich příslušných antičástic) a všechny jevy, které ve vesmíru pozorujeme, dovedeme vysvětlit pomocí čtyř druhů interakcí.



**Obr. 1.2** Sjednocování popisu fyzikálních polí

Z tohoto vývoje je pro lékařskou fyziku důležitý závěr, že rozvoj poznání vede spíše k sjednocování různých typů interakcí hmoty, nikoliv k objevu interakcí nových. Je tedy velmi nepravděpodobné, že by byly objeveny nové interakce související s životem. Existenci takovýchto biopolí předpokládají představitelé různých forem alternativní medicíny a současná věda takovéto představy nepodporuje.

## 1.2 ENERGIE

Energií charakterizujeme schopnost hmoty konat práci. Celková energie  $E$  částice (nebo systému částic) nacházející se v silovém poli je dána součtem klidové energie  $E_0$ , kinetické energie  $E_k$  a potenciální energie  $E_p$ , tedy

$$E = E_0 + E_k + E_p \quad (1.1)$$

kde  $E_0$  je energie svázaná s **klidovou hmotností**  $m_0$  známým Einsteinovým vztahem

$$E_0 = m_0 c^2 \quad (1.2)$$

kde  $c$  je rychlost šíření světla ve vakuu. Velikost této rychlosti je  $3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ , což představuje nejvyšší rychlost, kterou se může šířit energie. Rychlost světla v látkovém prostředí je vždy menší než rychlost světla ve vakuu a je dána poměrem  $c/n$ , kde  $n$  je index lomu příslušného prostředí. Foton, který má nulovou hmotnost, má samozřejmě nulovou klidovou energii. Fotony v klidu neexistují, šíří se ve vakuu ve všech souřadnicových soustavách rychlostí  $c$ .

Hmotnost  $m$  částic s nenulovou klidovou hmotností ( $m_0 > 0$ ), které se pohybují relativistickou rychlostí (rychlostí blízkou rychlosti světla ve vakuu), roste podle vztahu

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1.3)$$

kde  $v$  je rychlost vzhledem k pozorovateli. Toto relativistické zvětšení hmotnosti můžeme pozorovat u částic urychlených v urychlovačích částic. Současně tento vztah ukazuje, že žádná částice nebo těleso nemůže být urychleno na rychlost světla ve vakuu, neboť výraz pod odmocninou ve jmenovateli ve vztahu 1.3 by byl nulový a hmotnost tedy nekonečná.

Kinetická energie  $E_k$  je definována známým vztahem

$$E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \quad (1.4)$$

kde  $p = mv$  je hybnost, a může nabývat nulových (při  $v = 0$ ) nebo kladných hodnot. Pokud se rychlost  $v$  blíží rychlosti světla ve vakuu, platí přesnější relativistický vztah

$$E = mc^2 = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \quad (1.5)$$

ze kterého můžeme odvodit vztah pro kinetickou energii:

$$E_k = mc^2 - m_0 c^2 = \left( \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) m_0 c^2 \quad (1.6)$$

Z tohoto vztahu (1.6) je vidět, že kinetická energie nezávisí na směru pohybu, ale pouze na velikosti rychlosti.

Hodnota potenciální energie  $E_p$  částice nebo tělesa závisí na tom, kde je zvolena její nulová hladina. V mechanice hmotného bodu známe vztah  $E_p = mgh$  pro mechanickou potenciální energii a její hodnota byla kladná či záporná podle toho, kde byla definována její nulová hladina (např. povrch Země). Pro centrální pole sil newtonovského typu, tj. takových, jejichž velikost závisí na kvadrátu vzdálenosti (např. Newtonův gravitační zákon nebo Coulombův zákon pro silovou interakci elektrických nábojů), se ukazuje výhodnější definovat nulovou hladinu potenciální energie „v nekonečnu“, tj. v takové vzdálenosti, kde síla vzájemné interakce klesá na nulovou hodnotu. Při takto definované nulové hladině potenciální energie (v nekonečnu) je její hodnota v konečné vzdálenosti záporná. Je rovna práci, kterou musíme vynaložit, abychom vzájemně se přitahující částice (nebo tělesa, elektrické náboje) vzdálili tak, aby jejich vzájemné silové působení bylo nulové (nebo zanedbatelné).

Jednotkou energie je v soustavě jednotek SI joule (J), který se definuje jako práce, kterou vykoná síla 1 N působící po dráze 1 m. V atomové fyzice a fyzice záření se energie většinou vyjadřuje v jednotkách elektronvolt (eV). Kinetickou energii 1 eV získá elektron urychlený potenciálním rozdílem 1 V; proto platí  $1\text{eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1 \text{ V}$ . Zároveň platí, že práce 1 J je vykonána přemístěním náboje 1 C libovolným způsobem mezi místy s potenciálním rozdílem 1 V, tedy  $1 \text{ J} = 1 \text{ C} \cdot 1 \text{ V}$ . Kombinací obou vztahů (jednotky veličin na pravé straně obou vzorců jsou totožné) dostaneme vztah mezi 1 J a 1 eV:  $1\text{eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ . Z výše popsaných vztahů také vyplývá, že náboj 1 C je roven celkovému náboji přibližně  $6 \cdot 10^{18}$  elektronů. Ve fyzice mikrosvětla slouží eV také jako míra hmotnosti. Přesnější jednotkou hmotnosti je  $1 \text{ eV} \cdot c^{-2}$ , kde  $c$  je rychlost světla ve vakuu (viz rovnici 1.2), takže 1 eV odpovídá  $1,8 \cdot 10^{-36} \text{ kg}$ . Tak například říkáme, že hmotnost elektronu  $m_e = 0,51 \text{ MeV}$ , hmotnost protonu  $m_p = 938,28 \text{ MeV}$  a hmotnost neutronu  $m_n = 939,57 \text{ MeV}$ .



V živé i neživé přírodě platí při všech interakcích zákon zachování energie, který říká, že energie může přecházet z jedné formy do druhé, nicméně v uzavřené soustavě její celkové množství zůstává stejné. Tak např. při anihilaci elektronu s pozitronem, jejichž hmotnost je rovna energetickému ekvivalentu 0,51 MeV, pozorujeme vznik dvou kvant záření (fotonů) právě o této energii. Nebo při chemické reakci  $C + O_2 \rightarrow CO_2 + \text{fotony}$  pozorujeme kinetickou energii molekuly  $CO_2$  a fotonů díky tomu, že součet hmotností atomu uhlíku a molekuly kyslíku  $O_2$  je poněkud větší než hmotnost molekuly  $CO_2$ . Tedy pokud u výchozích složek reakce by byla všechna energie ve formě energie klidové, pak u konečných produktů je představována součtem energie klidové a kinetické. V každém případě se však celková energie zachovává, mění se jen její nositelé a forma, ve které se projevuje.

### 1.3 KVANTOVÉ JEVY

Pro pochopení dějů v atomu bylo navrženo několik jeho modelů. Vždy se jedná o zjednodušení, která předpokládají, že kolem hmotného jádra obíhají elektrony po kruhových drahách díky působení přitažlivých elektrostatických sil. Tyto dráhy jsou jen v určitých, diskrétních vzdálenostech od jádra a mají specifické energie. Hodnoty diskrétních vzdáleností představují pouze nejpravděpodobnější vzdálenosti, kde se elektrony vyskytují.

Zákony klasické fyziky nepostačují pro popis fyzikálních jevů probíhajících v mikrosvětě atomů nebo molekul a při interakcích subatomických částic. V této oblasti přírody se setkáváme s fyzikálními veličinami, u kterých lze stav spočítat pouze v rámci určité pravděpodobnosti, jejich hodnoty se mění nespojitě. Je to dáno tím, že systémy z nich utvářené, tj. atomy nebo molekuly, mají částicový i vlnový charakter. Tento korpuskulárně-vlnový dualismus byl experimentálně ověřen na vlastnostech světla i elektronů. Interference a difrakce světla prokazují, že světlo je vlnění. Naopak fotoefekt prokazuje, že se šíří v kvantech energie, nazývaných fotony.

V kvantové fyzice se často setkáme s fyzikální veličinou nazývanou *účinek*, jejíž fyzikální rozměr je dán součinem energie a času a jejíž jednotka je tedy J·s. Podobně jako v teorii relativity, kde je základní konstantou rychlost světla ve vakuu  $c$ , je v kvantové mechanice základní konstantou kvantum účinku  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$  J·s, nazývané **Diracova konstanta** nebo redukovaná Planckova konstanta. S hodnotou **Planckovy konstanty**  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  J·s je spojena převodním vztahem  $\hbar = h/2\pi$ . Tyto konstanty vystupují v důležitých vztazích, které kvantitativně spojují částicový a vlnový charakter hmoty. Planckova konstanta představuje nejmenší možnou dávku energie vyzařované tělesem.

Jedním z nejdůležitějších vztahů je vztah mezi energií  $E$  fotonu a frekvencí  $f$  světelné vlny a její vlnové délky  $\lambda$

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.7)$$

kde  $c$  je rychlost šíření světla ve vakuu. Pravá část rovnice 1.7 vyplývá z toho, že vlnová délka je vzdálenost, kterou vlnění urazí za dobu jedné periody  $T$ , která je převrácenou hodnotou frekvence, tedy  $\lambda = cT = c/f$ . Ze vztahu 1.7 vyplývá důležitý závěr, že s rostoucí frekvencí roste energie fotonu. Rozsah frekvencí je velký, světelná vlna se liší také způsobem generování a fyzikálními účinky. Proto její detekce je rozdílná. Vlnění s frekvencí řádu  $10^5$ – $10^{10}$  Hz

se detekuje pomocí radiotechnických metod jako je např. elektromagnetická indukce. Jelikož fotony mají při těchto frekvencích poměrně malou energii, je toto záření neškodné pro biologickou tkáň. Proto se tyto frekvence v hojně míře využívají třeba pro přenos rádiových nebo televizních signálů a v lékařské diagnostice u magnetické rezonance. S frekvencemi řádu  $10^{11}$ – $10^{14}$  Hz je spojeno infračervené záření, které vysílá každé těleso s teplotou vyšší než absolutní nula v závislosti na své teplotě (vyzařovaná frekvence roste s teplotou). Toto záření se registruje tepelnými metodami (člověk může toto záření vnímat jako teplo) nebo termograficky. V lékařství se využívá např. pro neinvazivní detekci zánětů. Následuje úzké frekvenční pásmo (přibližně  $4 \cdot 10^{14}$  až  $7,9 \cdot 10^{14}$  Hz) pro viditelné světlo, které vnímá člověk. Těmto hraničním frekvencím odpovídají vlnové délky 780 nm (červená barva) a 380 nm (fialová barva). S fialovou barvou hraničí ultrafialové záření s frekvencemi  $10^{15}$ – $10^{17}$  Hz, které je generováno tělesy s vysokou teplotou (např. Slunce). Od těchto frekvencí má záření ionizační účinky, protože fotony nesou již dostatečnou energii potřebnou k ionizaci. Člověk by se proto měl před tímto zářením chránit, protože takto energetické záření může poškodit např. DNA. Rentgenové záření s frekvencemi  $10^{17}$ – $10^{20}$  Hz vzniká např. v rentgenkách při prudkém zabrzdění elektronů emitovaných žhavenou katodou. V lékařství se rentgenové záření využívá především v diagnostice (např. ve výpočetní tomografii – CT). Gama-záření ( $> 10^{19}$  Hz) vzniká při radioaktivních a jiných jaderných a subjaderných dějích (např. anihilace). Způsobuje – podobně jako rentgenové záření – popáleniny, poškození DNA apod. V medicíně se používá např. v nukleárním lékařství (pozitronová emisní tomografie – PET) nebo pro sterilizaci lékařských nástrojů.

Korpuskulárně-vlnový dualismus je ale vlastní i látkovým částicím, tedy např. elektronům. Pohyb látkové částice o relativistické hmotnosti  $m$ , hybnosti  $p$  a kinetické energii  $E$  je spjat se šířením hmotnostních vln, jejichž vlnová délka  $\lambda$  je dána vztahem

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} \quad (1.8)$$

a nazývá se **de Broglieho vlnová délka**. De Broglieho hypotéza říká, že každému volnému hmotnému objektu s hybností  $p$  je přiřazena rovinná monochromatická vlna (tzv. de Broglieho vlna) o vlnové délce dané výrazem 1.8. Z tohoto vztahu vyplývá, že částice s krátkými vlnovými délkami mají větší energii než s delšími. Frekvence  $f$  této vlny je dána vztahem analogickým jako pro světelnou vlnu, viz rovnici 1.7, tedy

$$f = \frac{E}{h} \quad (1.9)$$

Korpuskulárně-vlnový charakter částic má ten důsledek, že není možné s libovolnou přesností určit současně dvě konjugované veličiny, např. polohu částice a její hybnost (rychlost) nebo energetické hladiny a čas. Tuto vlastnost popisuje tzv. **Heisenbergova relace neurčitosti**, která stanovuje jako nejmenší možnou chybu popisu částice dvěma veličinami chybu rovnou hodnotě Planckovy konstanty. Díky malé hodnotě Planckovy konstanty tato Heisenbergova relace neurčitosti nepředstavuje téměř žádné omezení pro popis těles v makrosvětě, na rozdíl od atomární úrovně. Zákon pohybu částice jsou popisovány **Schrödingerovou rovnicí**. Řešením této rovnice, která přesahuje rámec tohoto textu, je vlnová funkce, jejíž fyzikální význam je, že absolutní hodnota její druhé mocniny udává hustotu pravděpodobnosti výskytu částice. Z řešení této rovnice pro elektron v poli atomového jádra vyplývá kvantování energetických hladin i existence stacionárních stavů elektronů v atomu.

### 1.3.1 Kvantová čísla

Podle kvantově-mechanických představ se elektrony v silovém poli jádra atomu nepohybují v určitých trajektoriích, ale každý elektron vytváří určitý oblak pravděpodobnosti svého výskytu, jehož tvar je závislý na celkové energii elektronu a na dalších vlastnostech, jako jsou orbitální moment hybnosti, magnetický moment a spin. Místo výskytu elektronu popsané rozdělením hustoty pravděpodobnosti výskytu se nazývá **orbital**. Kdybychom mohli elektron pozorovat, vyskytoval by se v různých vzdálenostech od jádra a na různých místech, avšak v některých místech by se vyskytoval častěji a v některých vůbec ne (tam, kde vlnová funkce nabývá trvale nulových hodnot). Stav elektronu v atomu je popsán vlnovou funkcí, která obsahuje tolik bezrozměrných parametrů, kolik je stupňů volnosti elektronu. Uvážíme-li i jeho vlastní rotaci, pak má elektron čtyři stupně volnosti. Jeho stav tedy může být určen čtyřmi parametry, tzv. **kvantovými čísly**. Kvantová čísla jsou s výjimkou spinového čísla přirozená čísla a určují geometrický tvar a symetrii oblaku elektronu.

**Hlavní kvantové číslo  $n$**  určuje celkovou energii elektronu a jeho vzdálenost od jádra. Jeho existence je důsledkem řešení Schrödingerovy rovnice pro elektron v poli jádra. Tak např. z kvantově-mechanické teorie atomu pro vodík vyplývá, že elektron se v něm může vyskytovat jedině v energetických hladinách  $E$  daných vztahem

$$E = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cdot \left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (1.10)$$

kde  $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$  kg je klidová hmotnost elektronu,  $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$  F·m<sup>-1</sup> je permitivita vakua,  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  C je náboj elektronu. Hlavní kvantové číslo je přirozené číslo a může nabývat hodnot  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Jeho hodnota zároveň určuje i slupku, ve které se elektron v elektronovém obalu jádra nachází. Hodnotám  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$  odpovídají slupky  $K, L, M, N, O, P$  a  $Q$ . Ze vztahu 1.10 vyplývá, že maximální hodnota celkové energie elektronu je **nulová**. Proto vazebná energie elektronu v poli jádra odpovídá jeho celkové energii. To je důvodem, proč nejnižší vazebnou energii mají valenční elektrony, které jsou nejvíce vzdálené od jádra.

**Vedlejší (orbitální) kvantové číslo  $\ell$**  nabývá pro elektron ve slupce, určené hodnotou hlavního kvantového čísla  $n$ , hodnot  $\ell = 0, 1, 2, \dots (n-1)$ . Určuje tvar i symetrii elektronového oblaku. Pro  $\ell = 0$  má oblak kulový tvar. Toto kvantové číslo je určeno kvantováním **orbitálního momentu hybnosti  $\vec{L}$** , který je definován jako vektorový součin polohového vektoru  $\vec{r}$  a vektoru hybnosti  $\vec{p} = m\vec{v}$ , tedy  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ . Závislost velikosti orbitálního momentu hybnosti elektronu na vedlejším kvantovém čísle je dána vztahem

$$L = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad (1.11)$$

Udává, kolik je uzlových ploch vlnové funkce. Hodnoty  $\ell$  se při spektroskopickém označení odpovídajících stavů označují písmeny tak, že hodnotám  $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5$  odpovídá značení  $s, p, d, f, g, h$ . Podle rovnice 1.11 má stav  $s$  nulový moment hybnosti, stav  $p$  má velikost momentu hybnosti  $\hbar\sqrt{2}$  atd. Kombinace hlavního kvantového čísla s písmenem reprezentujícím orbitální moment hybnosti tvoří užívané značení elektronových stavů. V této notaci např. stav  $s$   $n = 2$  a  $\ell = 0$  je  $2s$ , stav odpovídající  $n = 4$  a  $\ell = 2$  je  $4d$  apod. Z rovnice 1.11 je též zřejmé, že přirozenou jednotkou orbitálního momentu hybnosti je  $J \cdot s$ , zjednodušeně  $\hbar$ .

**Magnetické kvantové číslo  $m$**  může nabývat hodnot  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots \pm \ell$  a určuje směr vektoru orbitálního momentu hybnosti v prostoru, tedy polohu orbitalu v prostoru. Elektron je elektricky nabitá částice. Proto, má-li orbitální moment hybnosti, musí existovat i magnetický moment, neboť pohyb elektrického náboje dává vznik magnetickému poli.

Magnetický orbitální moment elektronu  $\vec{\mu}$  souvisí s jeho orbitálním momentem hybnosti  $\vec{L}$  vztahem

$$\vec{\mu} = -\left(\frac{e}{2m_e}\right)\vec{L} \quad (1.12)$$

kde  $m_e$  je hmotnost elektronu. Veličina  $e/2m_e$  se nazývá **gyromagnetický poměr**. Z rovnice 1.12 je zřejmé, že magnetický moment elektronu má opačný směr než orbitální moment hybnosti. Velikost orbitálního momentu elektronu je kvantována dle rovnice 1.11. Je však kvantován též jeho směr vzhledem k vnějšímu magnetickému poli. Fyzikální význam magnetického kvantového čísla je ten, že určuje směr vektoru  $\vec{L}$ ; určuje jeho složku ve směru vnějšího magnetického pole. Je-li tedy vnější magnetické pole dáno vektorem magnetické indukce  $\vec{B}$ , pak magnetické číslo  $m$  určuje velikost průmětu  $\vec{L}_B$  vektoru  $\vec{L}$  do směru vektoru  $\vec{B}$ , a velikost tohoto průmětu je pak  $m \cdot \hbar$ . Vektor orbitálního momentu hybnosti nemůže být nikdy paralelní nebo antiparalelní k vektoru vnějšího magnetického pole, protože jeho složka do tohoto směru je vždy menší než jeho velikost určená rovnicí 1.11, tedy  $|\vec{L}_B| < L$ . Je-li jeho směr kolmý na směr vektoru vnějšího magnetického pole, tak samozřejmě jeho složka do tohoto směru je nulová a  $m = 0$ . Vektor orbitálního momentu hybnosti (a tedy také vektor magnetického momentu) nemůže nikdy zaujímat trvale určitý směr v prostoru, nýbrž sleduje povrch kužele tak, že jeho projekce do směru vnějšího magnetického pole má hodnotu  $m \cdot \hbar$ .

V souvislosti s tím, že přirozenou jednotkou orbitálního momentu hybnosti je  $\hbar$ , je vzhledem k rovnici 1.12 jednotkou magnetického orbitálního momentu hybnosti elektronu v atomové fyzice tzv. **Bohrův magneton**  $\mu_B = e\hbar/2m_e = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ .

Elektron má vlastní, vnitřní moment hybnosti, spin, který vyplývá z jeho rotačního pohybu a je nezávislý na jeho orbitálním momentu hybnosti. Má však též určitý magnetický moment svázaný s tímto vnitřním momentem hybnosti. **Spinový moment hybnosti**  $\vec{S}$  elektronu má jedinou velikost danou vztahem

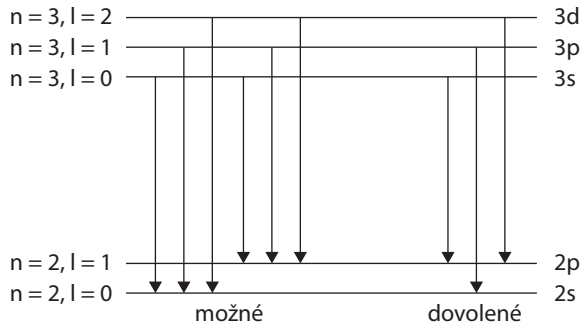
$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} \quad (1.13)$$

kde  $s = 1/2$  je **spinové kvantové číslo**. Po jeho dosazení dostáváme pro velikost spinového momentu  $S = \sqrt{3}/2 \hbar = 0,866 \hbar$ . Vektor spinového momentu hybnosti tedy může mít ve vnějším magnetickém poli dvě orientace, popsané dvěma hodnotami spinového magnetického kvantového čísla  $\pm 1/2$ . Složka vlastního momentu hybnosti elektronu ve směru vnějšího magnetického pole je určena spinovým magnetickým číslem, její velikost je  $\pm \hbar/2$ .

Kvantový stav elektronu v atomu je tedy plně určen souborem čtyř kvantových čísel:  $n$ ,  $\ell$ ,  $m$  a  $s$ . Elektronové konfigurace atomů s více elektrony se podřizují Pauliho vylučovacímu principu. To znamená, že žádné dva elektrony v atomu nemohou existovat ve stejném kvantovém stavu a tedy každý elektron v daném atomu musí mít jiný soubor kvantových čísel. V každé slupce určené hlavním kvantovým číslem  $n$  je počet elektronů určen vztahem

$$2 \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2n^2 \quad (1.14)$$

Při přechodu elektronů z jedné energetické hladiny do jiné následkem absorpce nebo emise energie jsou nejpravděpodobnější ty přechody, při kterých se hlavní kvantové číslo může měnit libovolně, ale vedlejší kvantové číslo se může měnit jen o  $\pm 1$ . Takovéto přechody nazýváme „dovolené“, ostatní jsou „zakázané“ (obr. 1.3).



**Obr. 1.3** Přechody elektronů z orbitu  $n = 3$  do orbitu  $n = 2$

To znamená, že z  $3 \times 2 = 6$  možných přechodů ze slupky  $M$  ( $n = 3$ ,  $\ell = 0, 1, 2$ ) na slupku  $L$  jsou dovolené jen přechody z  $3d$  na  $2p$ , z  $3p$  na  $2s$  a konečně z  $3s$  na  $2p$ . Existence zakázaných přechodů umožňuje získání stavu tzv. inverze v kvantových zesilovačích světla, laserech (viz kap. 8.1.2 – Lasery).

## 1.4 ATOM VODÍKU

Nejjednodušším systémem složeným z nukleonů a elektronů je atom vodíku. V něm se pohybuje jeden elektron v silovém poli jednoho protonu. Vzdálenost od jádra, ve které se elektron vyskytuje s největší pravděpodobností, je možné určit z Heisenbergovy relace neurčitosti. Probíhá-li pohyb ve vzdálenosti  $r$  od jádra, pak neurčitost určení vzdálenosti elektronu můžeme považovat za rovnu právě  $r$ .

Energie elektronu v poli jádra je dána součtem jeho kinetické a potenciální energie. Kinetická energie  $E_k$  je s použitím rovnice 1.4 dána vztahem

$$E_k = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \quad (1.15)$$

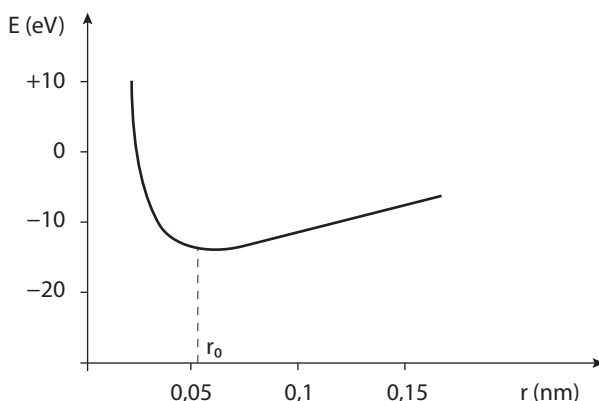
kde  $m_e$  je hmotnost elektronu. Potenciální energie  $E_p$  elektronu s nábojem  $-e$  v silovém poli protonu s nábojem  $+e$  je ve vzdálenosti  $r$  dána vztahem

$$E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \quad (1.16)$$

kde  $\epsilon_0$  je permitivita vakua.

Potenciální energie elektronu v poli jádra je záporná. Největší (nulové) hodnoty nabývá v „nekonečné“ vzdálenosti od jádra, kdy silové působení nábojů elektronu a jádra je zanedbatelné. Pro celkovou energii  $E$  elektronu v poli jednoho protonu tak dostáváme

$$E = E_k + E_p = \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.17)$$



**Obř. 1.4** Celková energie elektronu jako funkce vzdálenosti  $r$  od jádra ( $r_0$  – Bohřův poloměr)

Hodnoty celkové energie elektronu v závislosti na jeho vzdálenosti od jádra vypočítané podle rovnice 1.17 ukazuje graf na obrázku 1.4. Křivka znázorňující celkovou energii má minimum pro určitou vzdálenost  $r_0$ . Elektron se s největší pravděpodobností vyskytuje právě v této vzdálenosti  $r_0$ , neboť tehdy má nejmenší celkovou energii a obecně platí ve všech oborech fyziky, že systémy s minimální energií jsou nejstabilnější. Ve stabilním stavu také atom nevyzařuje žádnou energii.

Vypočteme-li tuto vzdálenost  $r_0$  z rovnice 1.17 z podmínky  $dE/dr = 0$  (extrém funkce najdeme z podmínky, kdy její první derivace v místě extrému se rovná nule), pak dostáváme pro  $r_0$  vztah

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (1.18)$$

Po dosazení číselných hodnot za fyzikální konstanty dostáváme

$$r_0 = \frac{4 \cdot 3,14 \cdot (8,8 \cdot 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}) \cdot (1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{(9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}) \cdot (1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C})^2} = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

Tato vzdálenost se nazývá **Bohrův poloměr**. Po zpětném dosazení za  $r$  do rovnice 1.17 pro celkovou energii elektronu výrazu pro  $r_0$  daném rovnicí 1.18 dostáváme pro energii elektronu základního stavu atomu vodíku výraz

$$E = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \quad (1.19)$$

Rovnice 1.19 odpovídá řešení Schrödingerovy rovnice pro elektron v poli protonu viz rovnice 1.10 v části 1.3.1 pro  $n = 1$  ( $n$  je hlavní kvantové číslo). Vztah pro energii základního stavu elektronu odvozený použitím relace neurčitosti tedy odpovídá kvantově mechanickému odvození diskretních hodnot energie v atomu vodíku. Stav s  $n = 1$  je základní stav, stavy s  $n = 2, 3, \dots$  jsou vybuzené, excitované stavy, do kterých elektron může přejít po předchozí absorpci energie. Po dosazení číselných hodnot v rovnici 1.10 dostáváme postupně pro  $n = 1, 2, 3, \dots$  až  $\infty$  hodnoty energie  $E_{n=1} = -13,6 \text{ eV}$ ,  $E_{n=2} = -3,38 \text{ eV}$ ,  $E_{n=3} = -1,5 \text{ eV}$  atd. až  $E_{n=\infty} = 0$ . Nejpravděpodobnější vzdálenost výskytu elektronu od jádra roste se čtvercem hlavního kvantového čísla. V základním energetickém stavu je elektron jádru nejbližší, ve vybuzeném stavu je jeho vzdálenost od jádra větší (uvědomte si, že  $-2 < -1$ ).

Z hlediska vlnové teorie (viz kap. 1.3) má elektron vlnovou délku  $\lambda$  definovanou vztahem 1.7, jejíž hodnota je závislá na jeho hybnosti. Je možné ukázat, že tato vlnová délka elektronu je stejná jako obvod kruhové dráhy o poloměru Bohrova poloměru  $r_0$ , tedy  $2\pi r_0 = 3,3 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ . Tento poznatek je možné zobecnit na tvrzení, že elektron se může pohybovat kolem jádra nekonečně dlouho, aniž by vyzařoval energii, za předpokladu, že jeho dráha obsahuje celočíselný počet de Broglieho vlnových délek elektronu, tedy platí-li

$$n\lambda = 2\pi r_0 \quad (1.20)$$

kde  $n$  je hlavní kvantové číslo.

### 1.4.1 Spektrum atomu vodíku

Vyšší energetický stav elektronu je časově nestabilní. Elektron rychle přechází do nižšího nebo základního energetického stavu za současné emise fotonu. Přejde-li elektron ze stavu s energií  $E_k$  do stavu s energií  $E_n$ ,  $k > n$ , pak je emitováno kvantum záření o energii rovné rozdílu energie těchto hladin; proto pro tuto vyzářenou energii dostáváme užitím rovnice 1.10 vztah

$$E = E_k - E_n = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (1.21)$$

Frekvence nebo vlnová délka tohoto záření je dána rovnicí 1.7. Vzhledem k diskretním hladinám energie může atom emitovat záření pouze o zcela určitých energiích (frekvencích, vlnových délkách). Proto je spektrum emitovaného záření nespojité, čárové. Jelikož atomy různých prvků se liší počtem protonů a elektronů, má každý unikátní spektrum.

Emisní čáry spektra atomů vodíku odpovídající přechodům na základní energetickou hladinu s  $n = 1$  (tzv. *Lymanova* série) leží v oblasti ultrafialové části spektra. Přechody elektronů

na energetickou hladinu s  $n = 2$  (tzv. *Balmerova série*) emitují záření ve viditelné části spektra. Spektrální čáry odpovídající přechodům na hladinu s  $n = 3$  a vyšším pozorujeme v oblasti infračerveného světla.

---

• **Výpočet:**

Například nejkratší vlnová délka Lymanovy série odpovídá přeskoku elektronu z „nekonečna“ (kdy hlavní kvantové číslo  $n = \infty$ ) na orbit odpovídající  $n = 1$ ; vyzářená energie bude podle rovnice 1.21

$$E = \frac{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C})^4}{32 \cdot (3,14)^2 \cdot (8,86 \cdot 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1})^2 \cdot (1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2} = 2,16 \cdot 10^{-18} \text{ J} =$$
$$= \frac{2,16 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} \cdot \text{eV}^{-1}} = 13,6 \text{ eV}$$

což odpovídá vlnové délce

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{(6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})(3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})}{2,16 \cdot 10^{-18} \text{ J}} = 92 \text{ nm}$$

Analogicky, nejkratší vlnová délka Balmerovy série ( $n = 2$ ) odpovídá vyzáření energie

$$E = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{2^2} = 0,54 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 3,38 \text{ eV}$$

a vlnová délka odpovídající této energii činí 368 nm; nachází se tedy na hranici viditelné části spektra elektromagnetického vlnění. Nejdélší vlnová délka této série bude příslušet vyzářené energii mezi hladinami odpovídajícími hlavním kvantovým číslům  $n = 2$  a  $n = 3$ ; můžeme ji určit ze vztahu

$$E = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 2,16 \cdot 10^{-18} \text{ J} \cdot \left( \frac{5}{36} \right) = 0,3 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 1,87 \text{ eV}$$

a přísluší jí vlnová délka 660 nm.

---

## 1.5 STRUKTURA ELEKTRONOVÉHO OBALU TĚŽŠÍCH ATOMŮ

Elektronová struktura atomu s více elektrony je určena dvěma základními pravidly:

1. Systém částic je stabilní, jestliže jeho celková energie je minimální.
2. V každém jednotlivém kvantovém stavu může v atomu existovat jen jeden elektron (*Pauliho vylučovací princip* je obecně platný pro fermiony).



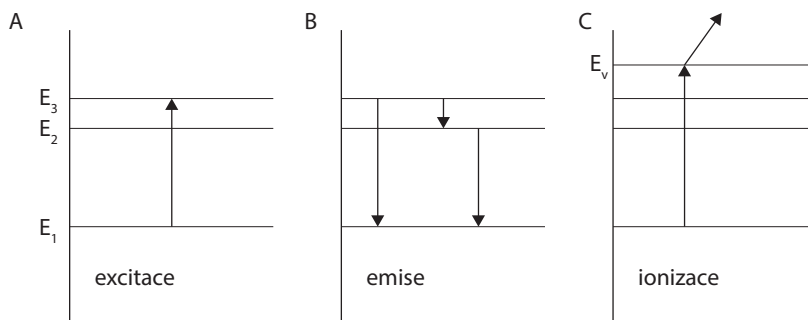
Podobně jako v atomu vodíku je stav elektronu v atomovém obalu těžších prvků určen dříve popsány kvantovými čísly. Určitý elektron se pohybuje v poli jádra o celkovém náboji  $Z \cdot e$ , kde  $Z$  je atomové číslo, zeslabené částečným stíněním způsobeným ostatními elektrony, které jsou jádru blíže než uvažovaný elektron. Všechny elektrony se stejným hlavním kvantovým číslem se vyskytují zhruba ve stejné vzdálenosti od jádra, a tudíž interagují v podstatě se stejným elektrickým polem a mají podobné energie. Říkáme, že obsazují stejnou slupku označenou písmenem  $K$ ,  $L$ ,  $M$  (viz kap. 1.3.1). Jak již bylo zmíněno, možný počet elektronů v určité slupce určené hlavním kvantovým číslem  $n$  je  $2n^2$ . Energie elektronu v určité slupce však také závisí na jeho orbitálním kvantovém čísle  $\ell$ , i když slaběji než na  $n$ . Podobně jako se v každé slupce s rostoucím  $\ell$  zvětšuje orbitální moment hybnosti elektronu (viz rovnici 1.11), roste i jeho energie. Kromě toho je závislost jeho energie na  $\ell$  tím větší, čím více elektronů obal obsahuje. Celkový orbitální i spinový moment hybnosti elektronů ve slupce zcela zaplněné elektrony je roven nule a rozložení jejich efektivního náboje je dokonale symetrické.

Periodicita fyzikálních a chemických vlastností prvků je způsobena postupným zaplňováním elektronových slupek. Kromě Pauliho vylučovacího principu se při obsazování elektronových slupek uplatňuje tzv. **Hundovo pravidlo**. To určuje, že kdykoli je to možné, elektrony v atomu zůstávají nespárované, tj. mají rovnoběžné spiny. Důvodem je vzájemné odpuzování elektronů v atomu. V důsledku tohoto odpuzování je energie atomu tím nižší, čím dále od sebe jsou jeho elektrony. Elektrony v jedné podslupce, jež mají stejný spin, musí mít různé hodnoty magnetického kvantového čísla, a jsou tedy popsány vlnovými funkcemi, jejichž prostorové uspořádání je různé. Elektrony s paralelními spiny jsou tudíž v prostoru více navzájem odděleny, než kdyby byly spárované; toto uspořádání, které má nižší energii, je proto stabilnější. U těžších atomů se setkáváme se skutečností, že jsou obsazovány vyšší slupky elektrony dříve, než je zcela zaplněna slupka předcházející vzhledem k možnému počtu  $2n^2$  elektronů. Tato skutečnost vyplývá z požadavku minimální celkové energie na stabilitu soustavy. Pořadí, v němž se elektronové slupky v atomech zaplňují, je následující:  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$ ,  $4s$ ,  $3d$ ,  $4p$ ,  $5s$ ,  $4d$ ,  $5p$ ,  $6s$ ,  $4f$ ,  $5d$ ,  $6p$ ,  $7s$ ,  $6d$  atd. Například stav  $3d$  má vzhledem k větší hodnotě  $\ell$  vyšší energii než stav  $4s$ , a proto se u atomů s rostoucím atomovým číslem  $Z$  elektronem obsazuje dříve hladina  $4s$  než  $3d$ . Než se začnou zaplňovat stavy vyšší slupky (větší  $n$ ), jsou zaplněny stavy  $s$  a  $p$  v předchozí slupce ( $n - 1$ ). Například v atomu železa má pět ze šesti elektronů podslupky  $d$  rovnoběžné spiny (tzv. nepárové elektrony), takže atom železa má velký výsledný magnetický moment, který způsobuje jeho feromagnetické vlastnosti.

## 1.6 EXCITACE, EMISE A IONIZACE, VAZEBNÁ ENERGIE ELEKTRONU

Stav atomu odpovídající jeho minimální energii se nazývá **základní**. Stavům, které mají vyšší energii, říkáme **vybuzené**, **excitované stavy**. Do excitovaného stavu se atom dostane absorpcí energie, např. pohlcením fotonu. Podle rovnice 1.21 atom absorbuje takovou energii, která odpovídá rozdílu základní a některé vybuzené hladiny (obr. 1.5). To vysvětluje, proč jsou absorpční spektra plynů čárová. Atom setrvává v excitovaném stavu krátkou dobu ( $10^{-9}$  až  $10^{-5}$  s). Při přechodu do některé z nižších energetických hladin je vyzářen rozdíl energií ve formě jednoho nebo více fotonů podle toho, uskuteční-li se přechod přímo na základní hladinu, nebo po etapách. Přechody elektronů z vyšších na nižší energetické hladiny jsou

podstatou **luminiscence**. Například při přechodu zpět na základní energetickou hladinu při situaci odpovídající obrázek 1.5B může být emitován buď jeden foton o energii  $hf = E_3 - E_1$ , nebo dva fotony o energiích  $hf' = E_3 - E_2$  a  $hf'' = E_2 - E_1$ . To je případ fluorescence, kdy doba emise fotonů nastává řádově během několika nanosekund.



**Obr. 1.5** Schéma excitace, deexcitace a ionizace: A – při excitaci přechází elektron na vyšší energetické hladiny; B – při deexcitaci přechází elektron na nižší energetickou hladinu, při tom vyzařuje (emituje) záření ve formě fotonů; C – ionizace je speciální případ excitace, kdy velikost absorpce energie umožňuje odtržení elektronu z atomu, protože absorbovaná energie je stejná nebo větší než vazebná energie  $E_v$

Při přechodech na nižší energetické hladiny se elektron může dostat do takové energetické hladiny, ze které je přechod do základního stavu tzv. zakázán (viz kap. 1.3.1). V tomto tzv. **metastabilním stavu** pak může setrvávat podstatně delší dobu. To je případ fosforescence, kdy vyzáření fotonů může trvat až několik minut. Deexcitace je vždy provázena emisí záření. Relativní šířka spektrální čáry je vnitřní vlastností atomu, přesněji řečeno těch energetických hladin, které se na přechodu zúčastní. Více o luminiscenci a jejím využití v lékařství vypovídá kapitola 11.4.

### ► Zajímavost 1.3

Zvláštním druhem luminiscence je bioluminiscence, kde světlo je produkováno živými organismy jako výsledek určitých biochemických reakcí. Jedná se o oxidaci luciferinu za přítomnosti enzymu luciferázy. Luciferiny jsou malomolekulové substráty tvořící biologické pigmenty. Luciferin můžeme najít u rozličných organismů, asi nejznámější jsou světlušky (*Lampyridae*). Bioluminiscenční světlo je světlem studeným, protože pouze kolem 8 % energie se přemění na teplo, zbytek je ve formě světelného záření (u Slunce je naopak energie vyzařována z 95 % ve formě tepla, zbytek je energie světelná). U některých organismů je bioluminiscence prostředkem pro komunikaci nebo k lákání jiných zvířat, která se tak mohou stát snadnou kořistí – světélkování využívají např. dravé ryby rodu *Ďas* (*Lophius*), které žijí ve velkých hloubkách.

**Energie vazby** částice v systému je obecně práce, kterou musí vnější síly vynaložit, aby tuto částici vzdálily ze systému. V tomto smyslu je vazebná energie elektronu v atomu rovna energii, kterou musíme elektronu dodat, abychom jej vzdálili z dosahu působení elektrostatických sil jádra do místa nulové hladiny („nekonečna“), kde tyto síly již nepůsobí. Dříve bylo ukázáno (viz rovnici 1.10), že celková energie  $E$  elektronu nacházejícího se v poli jádra je záporná a největší (nulové) hodnoty nabývá pro  $n = \infty$ . Proto je tedy vazebná energie  $E_v$  v tomto systému určena z podmínky

$$E_v + E = 0 \quad (1.22)$$

Energie vazby elektronu v poli jádra je tedy číselně rovna jeho celkové energii. Z rovnice 1.10 je zřejmé, že největší vazebnou energii v systému jádro–elektron mají elektrony s nejmenším hlavním kvantovým číslem, které jsou také jádru nejbližší. U složitějších atomů, než je jádro vodíku, pro které tato rovnice platí, závisí energie elektronů na kvadrátu atomového čísla. Proto jsou vazebné energie elektronů v různých atomech pro stejnou hodnotu hlavního kvantového čísla přibližně  $Z^2$ krát větší. Například celková energie elektronu ve slupce  $K$  atomu vodíku je  $-13,6$  eV, a tedy jeho vazebná energie je  $-(-13,6 \text{ eV}) = 13,6$  eV; u atomu uranu ( $Z = 92$ ) je tedy vazebná energie elektronu ve slupce  $K$  ( $n = 1$ ) řádově  $10^5$  eV ( $92^2$ krát větší).

Vazebnou energii nazýváme též *výstupní prací* nebo *ionizačním potenciálem*. Je to energie, kterou je nutno dodat na odtržení elektronu z atomu. U atomu s více elektrony existují různé hodnoty ionizačních energií, neboť elektrony mají v různých energetických hladinách různé vazebné energie. Pochopitelně nejmenší vazebnou energii mají valenční elektrony, které jsou ve vnější slupce nejvíce vzdálené od jádra.

Získá-li elektron energii větší, než je jeho vazebná energie, např. ozářením kvanty ionizujícího záření (rentgenové záření, záření  $\gamma$ ) nebo interakcí s korpuskulárním zářením, pak se část této energie spotřebuje na výstupní práci a zbytek se projeví jako kinetická energie vyraženého elektronu (viz obr. 1.5C). Ze zákona zachování energie pak přímo vyplývá známý Einsteinův vztah pro vnější fotoefekt:

$$hf = E_v + \frac{1}{2}mv^2 \quad (1.23)$$

Ionizací vzniká z elektricky neutrálního atomu kladný iont (tzv. pozitivní ionizace), neboť převládá kladný náboj jádra. Ionizací se též zvýší celková energie soustavy jádro–elektrony (ubyla záporná energie vyraženého elektronu). Proto má ionizovaný atom větší energii než atom v základním energetickém stavu, a tudíž je v čase nestabilní a má tendenci přejít zpět do základního stavu s minimální energií. Byl-li vyražen elektron z některé z vnitřních slupek, atom se zbavuje energie postupným zaplňováním nižších energetických hladin elektrony z hladin vyšších při současně emisi energetických rozdílů ve formě **fluorescenčního záření**. Toto záření má vždy menší energii  $hf'$  a nižší frekvenci  $f'$ , než je energie  $hf$  a frekvence  $f$  záření, které vyvolalo ionizaci. Došlo-li k ionizaci valenčního elektronu, sníží se energie systému připoutáním některého z volných elektronů okolního prostředí.

Při vícenásobné ionizaci atomu je energie potřebná k vyražení druhého, třetího atd. elektronu vždy větší než energie potřebná k vytvoření jednomocného iontu, neboť s rostoucím počtem vyražených elektronů roste náboj vytvářeného vícemocného iontu a jádro více přitahuje zbývající elektrony obalu.

Elektrony jsou v atomu udržovány přitažlivými silami kladného jádra. Toto silové pole přitahuje také volný elektron, jestliže se nachází v blízkosti atomu. Tento elektron je však současně odpuzován ostatními elektrony obalu atomu. Výpočty i experimentální zkušenost potvrdily, že u některých atomů jsou přitažlivá působení silnější než odpudivé síly. Tyto atomy mohou přitáhnout elektron a vytvářet stabilní jednomocný iont (tzv. negativní ionizace).

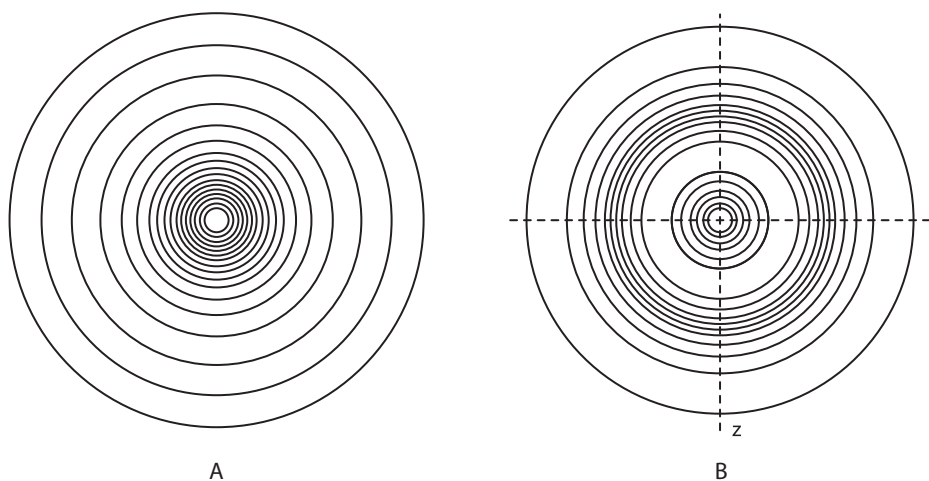
Změna, která nastane v obalu těžšího atomu po absorpci energie, je závislá na její velikosti. Je-li absorbovaná energie malá, řádově eV, dochází k ionizaci slabě vázaných elektronů. Elektrony vnitřních slupek jsou u těžkých atomů vázány mnohem silněji, jejich vazebné energie pro

slupku  $K$  jsou řádově až desítky keV a více. Jsou-li excitovány nebo ionizovány elektrony těchto vnitřních slupek těžkých atomů, jsou pak při deexcitaci emitována kvanta záření o energii (vlnové délce) odpovídající rentgenovému záření. Obecně může být excitovaným atomem emitováno záření, jehož vlnové délky přísluší oblastem infračerveného, viditelného nebo ultrafialového světla i rentgenového záření, podle velikosti rozdílu energetických hladin při deexcitaci.

## 1.7 VLNOVĚ MECHANICKÝ MODEL ATOMU

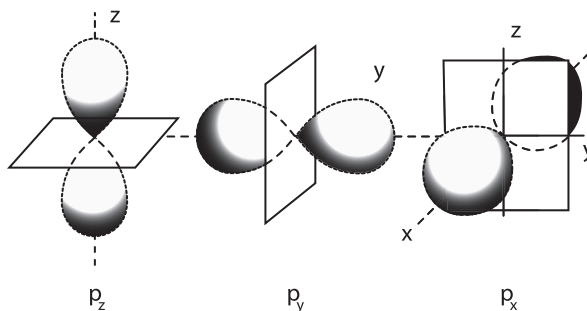
V kvantové mechanice, která vychází z představ L. de Broglieho o vlnových vlastnostech částic (viz kap. 1.3), je stav elektronu v atomu popsán Schrödingerovou diferenciální rovnicí pro vlnovou funkci. Řešení této rovnice vede k závěru, že stacionární stavy jsou pouze ty, kterým odpovídá stojaté vlnění. Jak již bylo řečeno dříve, elektron se podle těchto představ vyskytuje ne na dráhách, ale v prostorových útvarech, které mohou mít různé tvary vzniklé jako statistický výsledek rychlých přeskoků z místa na místo rozkmitaného stavu elektronu ve vakuu. Tyto kmity se skládají ve výsledné vlnění. Výsledné vlnění se může šířit v atomu jednak radiálně, jednak tangenciálně v uzavřených drahách kolem jádra, kdy se po obvodu střídavě vytvářejí kmitny a uzly. Tvar „oblaku“ elektronu, orbitalu, pak závisí na tom, kolik z celkového počtu vlnových délek stojatého vlnění je rozloženo po obvodu a kolik radiálně.

Hlavní kvantové číslo  $n$  udává počet vlnových délek stojatého vlnění v atomu, vedlejší kvantové číslo  $\ell$  pak udává počet vlnových délek připadajících na obvod. Nejmenší možné vedlejší kvantové číslo je  $\ell = 0$ . V tomto případě nepřipadá na oběh kolem jádra žádná vlna, po obvodu se nestřídají kmitny a uzly, hustota oblaku je po obvodu všude stejná. Stavům  $s$  ( $\ell = 0$ ) tedy odpovídá kulová symetrie orbitalu, který pojme dva elektrony s magnetickými spinovými kvantovými čísly  $\pm \frac{1}{2}$ . Orbital  $1s$  je znázorněn na obr. 1.6A, orbital  $2s$  na obr. 1.6B, kdy dvě kmitny elektronem vytvářené jsou odděleny uzlovou plochou, kde je hustota oblaku nulová.



**Obr. 1.6** Diagram elektronové hustoty orbitalů  $1s$  (A) a  $2s$  (B)

Připadá-li na obvod atomu jedna vlnová délka ( $\ell = 1$ ), existují v tangenciálním směru dvě kmitny oddělené uzly, které mohou být vzhledem k osám  $x$ ,  $y$ ,  $z$  orientovány třemi způsoby (obr. 1.7). To také odpovídá tomu, že při  $\ell = 1$  může magnetické kvantové číslo  $m$  nabývat hodnot  $-1, 0, 1$ . Celkem tedy mohou existovat při daném hlavním kvantovém čísle  $n$  tři orbitaly  $p$  ( $\ell = 1$ ), z nichž každý pojme dva elektrony s opačným spinem, tedy celkem může být ve stavu  $p$  šest elektronů. Základní podmínkou je, že orbital může mít kmitny všude tam, kde je hustota ostatních orbitalů nulová. Orbitaly stavů  $d, f, \dots$  mají tvary složitější.



Obr. 1.7 Obrysové znázornění orbitalu  $2p$

## 1.8 JÁDRO ATOMU

Chemické i optické vlastnosti atomů jsou určeny vlastnostmi jejich elektronů. Ty naopak souvisejí s vlastnostmi atomových jader. Jádra atomů jsou tvořena nukleony – protony a neutrony. Mezi základní charakteristiky jádra patří: **atomové číslo  $Z$** , které udává počet protonů v jádře, **hmotnostní číslo  $A$** , které udává celkový počet nukleonů, a **neutronové číslo  $N$** , udávající počet neutronů. Tedy platí  $A = Z + N$ .

Jelikož atomy jsou elektricky neutrální, udává atomové číslo také počet elektronů v elektronovém obalu neionizovaných atomů. Celkový náboj jádra je  $Z \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}$  C.

V jádře je soustředěna převážná část hmotnosti atomu, neboť hmotnost protonu je asi 1840krát větší než hmotnost elektronu. Atomová hmotnost se obvykle vyjadřuje v hmotnostních jednotkách. 1 hmotnostní jednotka (h.j.) je  $1/12$  hmotnosti izotopu uhlíku  $^{12}\text{C}$ . Číselně je rovna  $1 \text{ h.j.} = 1,66 \cdot 10^{-27}$  kg. Její energetický ekvivalent činí 931 MeV. Atomovou hmotnost lze měřit pomocí hmotnostních spektrometrů.

**Izotopy** nazýváme atomy se stejným nábojem, ale různou hmotností jádra (stejná  $Z$ , různá  $A$ ). V přírodě se vyskytuje přibližně 280 stabilních izotopů. Spolu s uměle vyrobenými převyšuje jejich počet 1100.

**Izobary** jsou atomy, jejichž jádra obsahují stejný počet nukleonů, ale mají rozdílný náboj (různé  $Z$ , stejná  $A$ ).

**Izomery** nazýváme atomy, jejichž jádra mají stejný počet nukleonů, mají však po určitou dobu zvýšenou celkovou energii. Proto také nejsou v čase stabilní. Jádra izomerů přebytečnou energii po určité době vyzáří ve formě částice nebo fotonu a přejdou na stabilnější energetickou hladinu.

Jádro atomu má velmi malé rozměry a jeho objem závisí na celkovém počtu nukleonů, tedy hmotnostním čísle  $A$ . Poloměr jader těžkých prvků je úměrný  $A^{1/3}$ . Např. pro jádro uranu  $R = 7,6 \cdot 10^{-15}$  m. Poloměr jádra se od vodíku k uranu zvětší jen 6,2krát. Z toho vyplývá velmi vysoká hodnota hustoty jaderné hmoty, a to  $10^{14}$  kg·m<sup>-3</sup>.

Z velikosti poloměru jádra a celkové velikosti atomu (řádově  $10^{-10}$  m) je zřejmé, že setrvačná hmotnost atomu zaujímá jen velmi malou část objemu atomu; v prostoru mezi jádrem a obalem působí silové pole náboje jádra, které působí na elektricky nabitě částice. Proto při výrobě umělých radionuklidů se většinou jádra bombardují elektricky neutrálními neutrony.

Nitrojaderné síly jsou projevem silné interakce (viz kap. 1.1), působí pouze v jádře atomu a jsou nezávislé na elektrickém náboji nukleonů; mezi dvěma protony (po odečtení coulombických sil) působí stejná síla jako mezi dvěma neutrony. Působí do vzdálenosti řádově  $10^{-15}$  m a při těchto vzdálenostech jsou to nejsilnější síly, které v přírodě známe.

## 1.8.1 Vazebná energie jádra

Pohyb nukleonů v jádře se řídí kvantově-mechanickými zákony. Vazebná energie atomového jádra charakterizuje jeho stabilitu. Energii vazby jádra je možné určit z celkového úbytku hmotnosti jádra, tzv. **hmotnostního defektu**. Označíme-li hmotnost protonu  $m_p$ , hmotnost neutronu  $m_n$ , pak hmotnost jádra složeného z protonů a neutronů by měla být dána součtem  $Z \cdot m_p + N \cdot m_n$ . Z měření hmotnosti jader  $m_{\text{jádro}}$  však vyplývá, že skutečná hmotnost jádra je o něco menší než teoreticky vypočtená. Rozdíl mezi hmotností vypočtenou a skutečnou (měřenou) se nazývá hmotnostní defekt  $\Delta m$ :

$$\Delta m = (Zm_p + Nm_n) - m_{\text{jádro}} \quad (1.24)$$

Z existence hmotnostního defektu vyplývá, že část klidové energie nukleonů reprezentované jejich klidovou hmotností se přeměňuje na vazebnou energii, která drží tento systém nukleonů pohromadě. Vzhledem k dříve uvedenému vztahu mezi energií a hmotností v rovnici 1.2 je k rozložení jádra na jednotlivé nukleony zapotřebí vynaložit minimálně energii  $\Delta E$ , jejíž velikost je

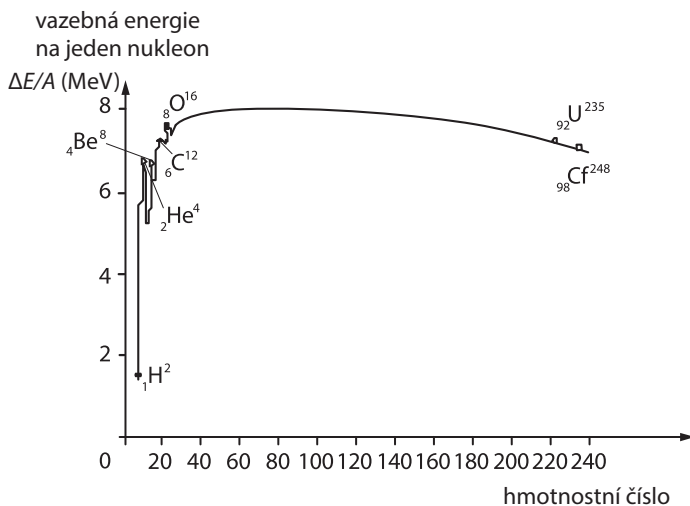
$$\Delta E = \Delta m \cdot c^2 \quad (1.25)$$

Z tohoto vztahu též vyplývá, že čím je hmotnostní defekt nebo vazebná energie větší, tím je jádro stabilnější.

Vazebná energie jádra se vztahuje na všechny jeho nukleony; např. hmotnostní defekt jádra helia <sup>4</sup>He činí 0,030 h.j., což odpovídá vazebné energii 28 MeV. Hmotnostní defekt jádra uranu <sup>235</sup>U je 1,908 h.j., což odpovídá  $\Delta E = 1741$  MeV.

Přepočítáme-li vazebnou energii jader na jeden nukleon, pak zjistíme, že vazebná energie připadající na jeden nukleon,  $\Delta E/A$ , je u různých atomů různá. Obrázek 1.8 ukazuje průběh závislosti této měrné vazebné energie na hmotnostním čísle. Z grafu je vidět, že u lehkých a těžkých jader činí měrná vazebná energie 7–7,5 MeV, kdežto pro středně těžká jádra je kolem 8,5 MeV. To znamená, že jádra prvků, které se nacházejí ve střední části periodického systému prvků, jsou nejstabilnější. Proto je také přeměna lehkých a těžkých jader na středně těžká energeticky výhodný proces, při němž se uvolní značná energie. Pro srovnání je třeba

si povšimnout, že vazebné energie chemických útvarů (molekul) jsou řádově několik eV, zatímco zde se jedná o hodnoty řádově MeV.



**Obr. 1.8** Měrná vazebná energie atomů

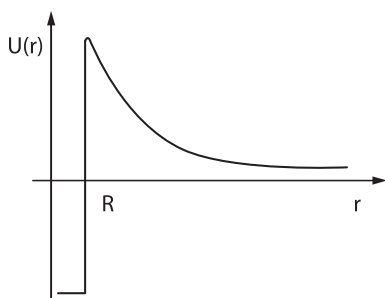
Z hodnot měrné vazebné energie pro různá jádra vyplývá další důležitá vlastnost nitrojaderných sil. Porovnáme-li měrnou vazebnou energii  $\Delta E/A$  pro jádra s různým hmotnostním číslem, vidíme, že s výjimkou lehkých prvků se měrné vazebné energie různých prvků příliš neliší. Je-li tedy v tomto přiblížení  $\Delta E/A$  zhruba konstanta, pak celková vazebná energie  $\Delta E$  je úměrná hmotnostnímu číslu  $A$ . To znamená, že jeden nukleon působí pouze na jeden nebo několik málo nukleonů, ale jistě ne na všechny, neboť v tomto případě by muselo být  $\Delta E$  úměrné součinu  $A \cdot (A-1)$ . Proto říkáme, že nitrojaderné síly jsou tzv. nasycené – na rozdíl od např. elektromagnetických sil, kdy jeden náboj působí na libovolný počet nábojů, které se nacházejí v jeho silovém poli.

Atomové jádro tvořené hadrony (protony a neutrony), které jsou kombinacemi elektricky nabitých kvarků, zaujímá velmi malý objem. Velikosti poloměrů jader, i těch nejtěžších jader uranu, jsou řádově fm ( $10^{-15}$  m). Nukleony v jádře jsou k sobě vzájemně poutány přitažlivými silami silné interakce, které jsou při takto krátkých vzdálenostech nejsilnější známé síly v přírodě. Tyto síly však rychle klesají s rostoucí vzdáleností  $r$ , úměrně  $r^{-13}$ , zatímco odpudivé síly mezi souhlasnými náboji, určené elektromagnetickou interakcí, klesají podle Coulombova zákona s rostoucí vzdáleností mnohem pomaleji, úměrně  $r^{-2}$ . Proto je možné v jádře působení elektromagnetické interakce vůči silné interakci zanedbat a jádro považovat v čase za stabilní.

Přibližuje-li se však k jádru s celkovým kladným nábojem  $Z \cdot e$  (kde  $Z$  je atomové číslo jádra a  $e$  je elementární náboj elektronu) částice s kladným nábojem  $z \cdot e$  (kde  $z$  je počet elementárních nábojů částice), musí překonávat odpudivé síly elektromagnetické interakce. Tyto síly rostou s klesající vzdáleností až do stavu, kdy začnou působit přitažlivé síly silné interakce, které přitáhnou částici do jádra. Tato situace nastává při vzdálenosti přibližně rovné poloměru jádra (řádově 1 fm). Schéma průběhu potenciálu  $U$  jako funkce vzdálenosti od středu jádra je uvedeno na obrázku 1.9. Potenciál odpudivých sil  $U$  roste s klesající vzdáleností

$r$  až do vzdálenosti efektivního poloměru jádra  $R$ , kdy začnou převládat přitažlivé síly silné interakce. Je-li částice uvnitř jádra, je v oblasti převažujících přitažlivých sil a tedy v tomto grafu v oblasti záporných hodnot potenciálu. Proto hovoříme o tzv. **potenciálové bariéře**, která má největší hodnotu ve vzdálenosti rovné přibližně poloměru jádra, a potenciálové jámě, odpovídající vnitřní oblasti jádra. Velikost Coulombovy potenciálové bariéry je úměrná  $Z \cdot z \cdot e^2 / R$ . Konstanta úměrnosti závisí na volbě jednotek energie. V atomové fyzice se pro energii většinou užívá jednotka elektronvolt (eV).

Hodnota Coulombovy bariéry protonu byla například využita k určení jeho poloměru z dat měření jeho rozptylu ( $R = 1,23 \cdot 10^{-15}$  m). Tato bariéra brání průběhu termonukleární reakce v plazmě, protože i při teplotách řádově tisíců kelvinů je kinetická energie kolidujících jader nižší než jejich potenciálová bariéra. Jádra se tudíž nemohou k sobě dostatečně přiblížit, aby mohlo dojít k jaderné fúzi, tedy k vytvoření sloučeného jádra a uvolnění vazebné energie. Vazebná energie přepočtená na jeden nukleon je větší v případě sloučení dvou lehkých prvků na jádro těžší (viz obr. 1.8). K trvalému průběhu jaderné fúze jsou nutné teploty řádově milionů kelvinů, které existují v nitru hvězd. Nicméně v současné době se v zařízeních typu tokamak již podařilo udržet podmínky pro jadernou fúzi po dobu několika sekund. S pojmem potenciálová bariéra se setkáváme také při vysvětlování tunelového jevu při rozpadu  $\alpha$  těžkých radionuklidů (viz obr. 10.4).



**Obr. 1.9** Potenciálová bariéra atomového jádra. Potenciál jádra je maximální na povrchu jádra (vzdálenost  $R$  odpovídá poloměru jádra), s rostoucí vzdáleností  $r$  od jádra se zmenšuje

## 1.8.2 Magnetické vlastnosti jader

Jak již bylo zmíněno v části 1.3, mají nukleony vlastní magnetický moment, spin, jehož hodnota je  $1/2 \hbar$ . Proto jádra atomů, která obsahují lichý počet protonů, neutronů (lichá-lichá jádra) nebo lichý počet nukleonů (jádra sudo-lichá), mají výsledný spin (daný vektorovým součtem spinů jednotlivých nukleonů) nenulový. Tato jádra mají též vlastní nenulový magnetický moment, neboť jak protony, tak neutrony, jsou systémy vytvářené elektricky nabitými kvarky a chovají se jako rotující magnety. Příkladem takových jader mohou být nuklidy  $^1\text{H}_1$ ,  $^2\text{D}_1$ ,  $^7\text{Li}_3$ ,  $^{13}\text{C}_6$ ,  $^{14}\text{N}_7$ ,  $^{19}\text{F}_9$ ,  $^{23}\text{Na}_{11}$ ,  $^{127}\text{I}_{53}$  aj. Existuje více než 100 stabilních atomů s magnetickým momentem a nenulovým spinem. Všechna jádra složená ze sudého počtu protonů a neutronů (sudo-sudá) mají výsledný spin nulový: jsou to např.  $^{12}\text{C}_6$ ,  $^{16}\text{O}_8$ ,  $^{14}\text{C}_6$ ,  $^{32}\text{S}_{16}$  apod. Spin jádra může být vyjádřen jako součin jaderného spinového čísla  $I$  a Diracovy konstanty, tedy  $I \cdot \hbar$ . Jádra se sudým hmotnostním číslem mají tedy v jednotkách  $\hbar$  celočíselný spin,



jádra s lichým hmotnostním číslem poločíselný spin. Například  ${}^2\text{D}$  a  ${}^{14}\text{Na}$  mají spinové číslo  $I = 1$ ,  ${}^7\text{Li}$  má  $I = 3/2$ ,  ${}^{127}\text{I}$  má  $I = 5/2$  a  ${}^{133}\text{Cs}$  má  $I = 7/2$ . Jádra se spinovým číslem  $I \geq 1/2$  mají  $(2I + 1)$  stabilních energetických stavů; např. proton vodíku se spinovým číslem  $1/2$  se může ve vnějším magnetickém poli vyskytovat ve dvou stabilních stavech. U jader s  $I > 0$  mohou být pozorovány jevy nukleární magnetické rezonance (viz kap. 11.5).

Magnetický moment  $\mu$  je vektorová fyzikální veličina, jejíž vektorový součin s magnetickou indukcí  $B$  homogenního magnetického pole se rovná momentu dvojice sil (točivému momentu) působícímu na objekty s magnetickým momentem v magnetickém poli, tedy  $[\mu \times B] = D$ , kde  $D$  je vektor momentu dvojice sil.

Velikost magnetického momentu jádra  $\mu_j$  je vyjadřována v jednotkách **jaderného magnetonu** definovaného jako  $e\hbar/2m_p$ , analogicky k Bohrovu magnetonu pro magnetický moment elektronu ( $e\hbar/2m_e$ ), jak je uveden v části 1.3.1. Je zřejmé, že jaderný magneton je menší než Bohrův magneton v poměru hmotnosti elektronu a protonu  $m_e/m_p$ , který činí  $1/1836$ . Zatímco hodnota Bohrova magnetonu činí  $9,2 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ , je velikost jaderného magnetonu  $5,05 \cdot 10^{-27} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ . Mohli bychom očekávat, že magnetický moment protonu bude jeden jaderný magneton, jako je magnetický moment elektronu jeden Bohrův magneton. Jelikož však proton není bodová částice jako elektron, ale je systémem složeným z elektricky nabitých kvarků, je jeho magnetický moment 2,8 jaderného magnetonu. Podobně neutron, který má výsledný náboj nulový, nemá magnetický moment nulový, ale o velikosti 1,9 jaderného magnetonu. Magnetický moment protonu je tedy 658krát menší než magnetický moment elektronu, a proto jsou magnetické projevy jader tak slabé a jejich efekty slabší oproti elektronům.

Nachází-li se jádro s určitým magnetickým momentem  $\vec{\mu}$  ve vnějším magnetickém poli určeném vektorem magnetické indukce  $\vec{B}$ , pak je jeho potenciální energie určena skalárním součinem  $(\vec{\mu}, \vec{B}) = \mu B \cos\theta$ , kde  $\theta$  je úhel, který tyto vektory svírají. Kromě toho působí na toto jádro otáčivý moment určený vektorovým součinem  $[\vec{\mu} \times \vec{B}]$ . Tomuto silovému působení vnějšího magnetického pole klade odpor moment hybnosti jádra, které se chová jako setrvačnick. Výsledkem vzájemného působení magnetického momentu jádra a vnější magnetické indukce je precesní pohyb vektoru magnetického momentu jádra kolem směru určeného vektorem vnější magnetické indukce. Magnetické vlastnosti jader jsou základem moderní diagnostické metody – nukleární magnetické rezonance (viz kap. 11.5).

## 1.9 SÍLY PŮSOBÍCÍ MEZI ATOMY

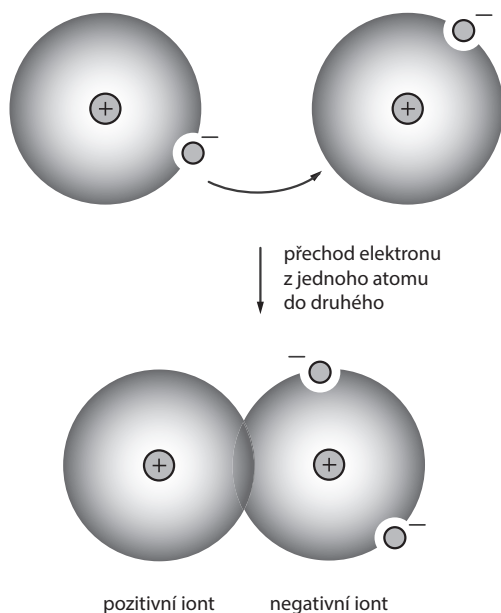
Souběžně s poznáváním struktury elektronového obalu se vyvíjela představa, že spojení atomů v molekuly je zprostředkováno elektrony. Platí obecný postulát: *Mezi atomy se vytváří chemické vazby jen tehdy, nastane-li jejich spojením ve vnějších elektronových vrstvách takové přeskupení valenčních elektronů, jemuž přísluší větší stabilita než elektronovým seskupením v izolovaných atomech.* Vnitřní elektrony zůstávají zpravidla chemickou vazbou nedotčeny.

Molekuly existují jako stabilní útvary proto, že energie spojeného, společného systému atomů je nižší než energie systému oddělených atomů. Snižuje-li tedy interakce mezi atomy jejich celkovou energii, mohou vytvořit molekulu. Přiblíží-li se navzájem dva atomy, může dojít ke kovalentní nebo iontové vazbě, nebo k vazbě vůbec nedojde.

Pokud se totiž elektronové struktury dvou atomů překrývají, tvoří dohromady jeden fyzikální systém a podle Pauliho vylučovacího principu nemohou být v takovém systému dva elektrony ve stejném kvantovém stavu. Jsou-li tedy některé interagující elektrony nuceny obsadit vyšší energetické stavy, než v jakých by byly v oddělených atomech, má systém větší energii, a je proto nestabilní. V těchto případech má tedy jejich vzájemné přiblížení za následek vznik odpudivých sil (Bornovy síly). Tyto odpudivé síly mají krátký dosah a klesají se vzdáleností úměrně  $r^{-13}$ , kde  $r$  je vzdálenost.

## 1.9.1 Iontová vazba

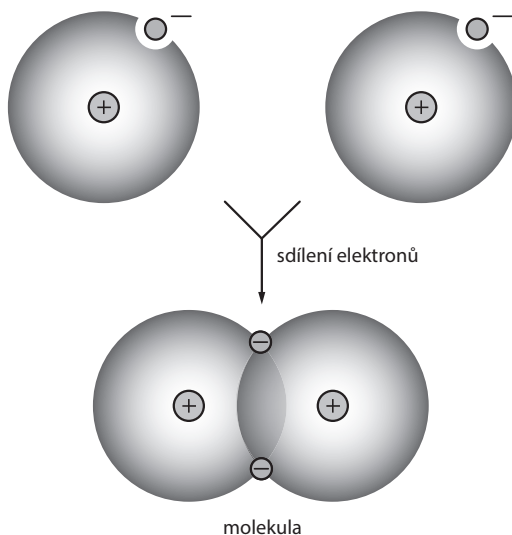
Při vzájemném přiblížení může jeden nebo více elektronů přejít z jednoho atomu do druhého a takto vzniklé kladné a záporné ionty (kationty a anionty) se navzájem přitahují (obr. 1.10). Tato vazba je tedy vytvářena coulombickými přitažlivými silami a působí na mnohem větší vzdálenost než vazba kovalentní. Vzdálenost mezi atomovými jádry iontů je při iontové vazbě větší než součet poloměrů atomů. Iontová vazba je kulově symetrická a není při ní preferován určitý směr nebo poloha. Je to vazba nenasytená, tzn. že počet iontů, které se mohou navzájem přitahovat, v podstatě není omezen. Vzájemným působením iontů opačného znaménka se vytvoří stálá konfigurace, v níž ionty zaujímají periodicky pravidelná místa v prostoru. Proto látky s iontovou vazbou obvykle vytvářejí krystaly. Typickými představiteli iontové vazby jsou vazby sloučenin kovů s halogeny, např.  $\text{Na}^+$  s  $\text{Cl}^-$ . Ovšem jakmile se krystaly pevné látky nacházejí v polárním rozpouštědle, dochází k vytrhávání iontů z krystalu a rozpouštění látky.



**Obr. 1.10** Iontová vazba – vzniká, když jeden nebo více elektronů valenční sféry atomu přejde do valenční sféry jiného atomu, čímž ze dvou elektricky neutrálních atomů vznikne elektricky pozitivní a negativní iont

## 1.9.2 Kovalentní vazba

Vazba kovalentní se vyskytuje častěji než vazba iontová. Kovalentní vazba vzniká při vzájemném přiblížení dvou atomů, kdy se jejich atomové orbitály vzájemně překrývají. Tím vznikne oblast, kde je možno s určitou pravděpodobností nalézt elektrony náležející původně jak k jednomu, tak k druhému atomu (obr. 1.11). Kovalentní vazba je následkem kvantově-mechanického jevu, nazývaného výměnný jev. Je projevem výměnných sil, které vznikají při vzájemném působení mezi dvěma nebo více atomy, což vede k tzv. **sdílení elektronů**, kdy jedna nebo více dvojic elektronů patří společně oběma atomům. Důležitou vlastností výměnných sil je jejich závislost na spinu elektronů. Vazba je velmi silná tehdy, jsou-li směry spinů antiparalelní. Výměnné vazby se mohou zúčastnit jen elektrony vnější a ne zcela zaplněné slupky atomu. V případě kovalentní vazby nebývá elektrický náboj rozložen v molekule symetricky a výsledná molekula má elektrické vlastnosti dipólu.



**Obr. 1.11** Kovalentní vazba – vzniká sdílením jednoho nebo více párů elektronů mezi dvěma prvky

K čistě kovalentní vazbě dochází v molekule vodíku  $H_2$ . Nejjednodušším molekulovým systémem je iont vodíkové molekuly  $H_2^+$ , kde jediný elektron váže dva protony. Že i tento systém může být stabilní, vyplývá z Heisenbergovy relace neurčitosti, kdy musí být hybnost částice, a tedy i její kinetická energie, tím větší, čím menší je prostor, ve které se nachází. Elektron sdílený dvěma protony je méně omezený v pohybu než elektron příslušející jedinému protonu a to znamená, že má menší kinetickou energii. Celková energie elektronu v  $H_2^+$  je tedy menší než v systému  $H^+H^+$ , a není-li vzájemné odpuzování protonů příliš velké, měl by být iont  $H_2^+$  stabilní.

Kovalentní vazba se uplatňuje na krátkou vzdálenost a je nejsilnější ze všech typů vazeb. Například energie vazby mezi dvěma atomy vodíku  $H-H$  je 4,3 eV. To ovšem znamená, že při vytvoření molekuly  $H_2$  se uvolní právě tato energie. Při vytvoření 1 molu  $H_2$  se tedy uvolní energie  $(6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}) \cdot (4,3 \text{ eV}) \cdot (1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} \cdot \text{eV}^{-1}) = 417 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ .