

ATOMY
+
MOLEKULY

ATOM VODÍKU

**MODEL :
STOJÍCÍ BODOVÉ JÁDRO A ELEKTRON
VZÁJEMNĚ ELEKTROSTATICKY INTERAGUJÍCÍ**

SCHRÖDINGEROVA ROVNICE $\hat{H}\psi = E\psi$

**PRO PŘÍPAD
POTENCIÁLNÍ ENERGIE** $\hat{V} = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$

ŘEŠENÍ HLEDÁME VE TVARU $\psi = R(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$

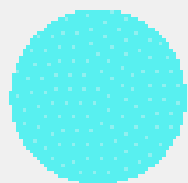
**KDE $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ JSOU VLASTNÍ FUNKCE
MOMENTU HYBNOSTI O VELIKOSTI $l(l+1)$ a
PRŮMĚTU m**

**ŘEŠENÍ LOKALIZOVANÉ V OKOLÍ JÁDRA
EXISTUJE JEN POKUD PLATÍ PRO ENERGII**

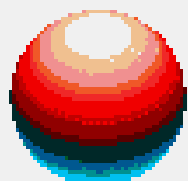
$$E_n = - \frac{mZ^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = - \frac{Z^2 \alpha^2 mc^2}{2n^2}$$

KDE n JE PŘIROZENÉ ČÍSLO

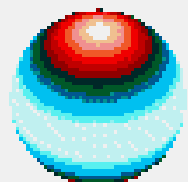
SFÉRICKÉ FUNKCE



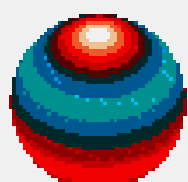
$Y_{0,0}$



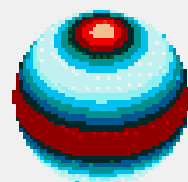
$Y_{2,0}$



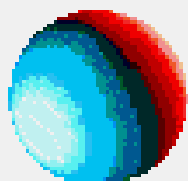
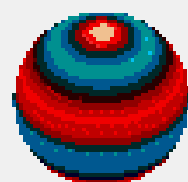
$Y_{4,0}$



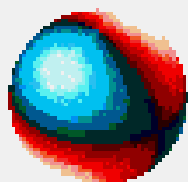
$Y_{6,0}$



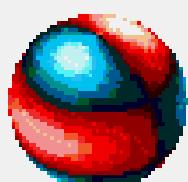
$Y_{8,0}$



$Y_{2,-1}$



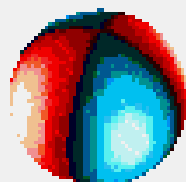
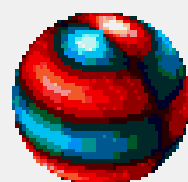
$Y_{4,-1}$



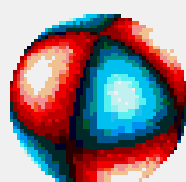
$Y_{6,-1}$



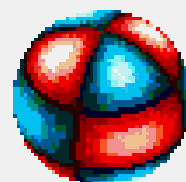
$Y_{8,-1}$



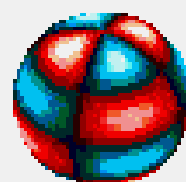
$Y_{2,2}$



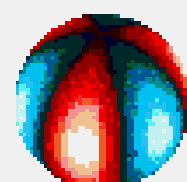
$Y_{4,2}$



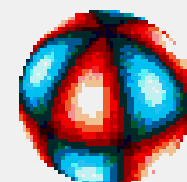
$Y_{6,2}$



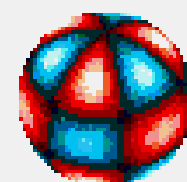
$Y_{8,2}$



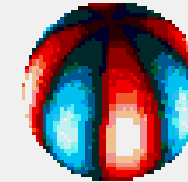
$Y_{4,4}$



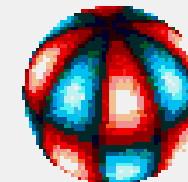
$Y_{6,4}$



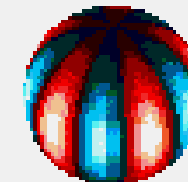
$Y_{8,4}$



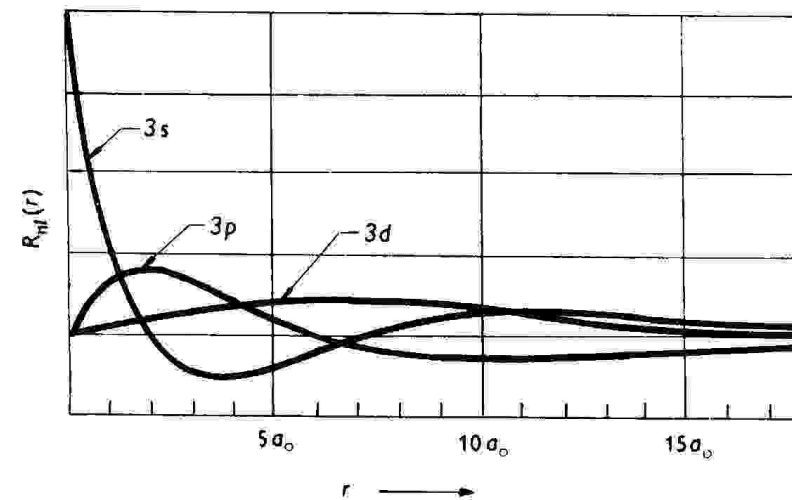
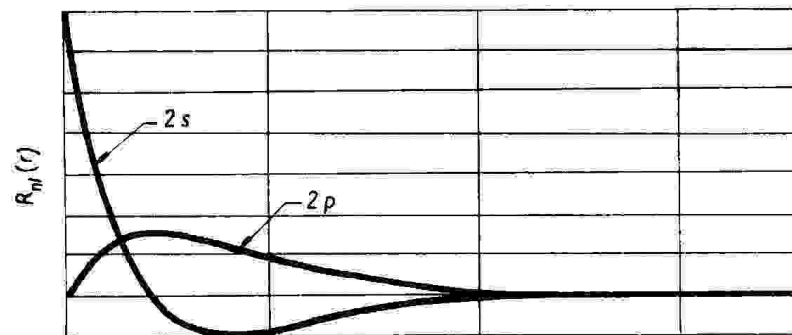
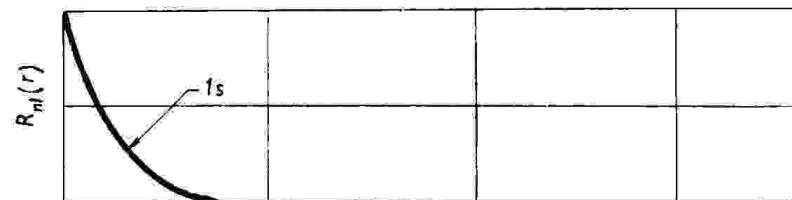
$Y_{6,6}$



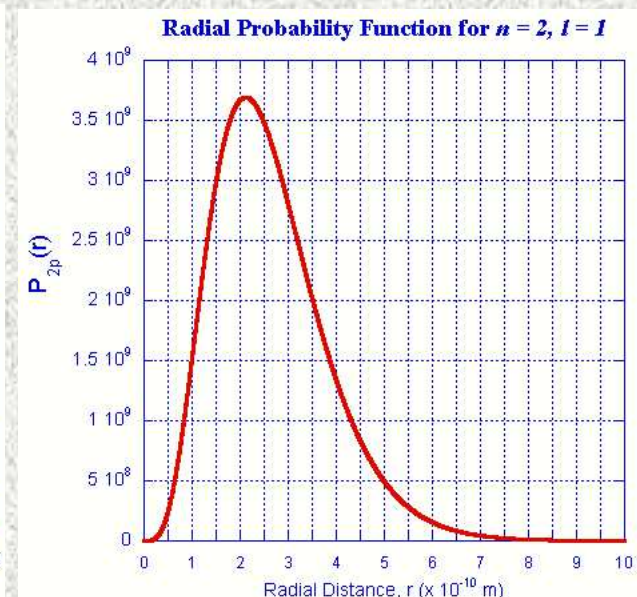
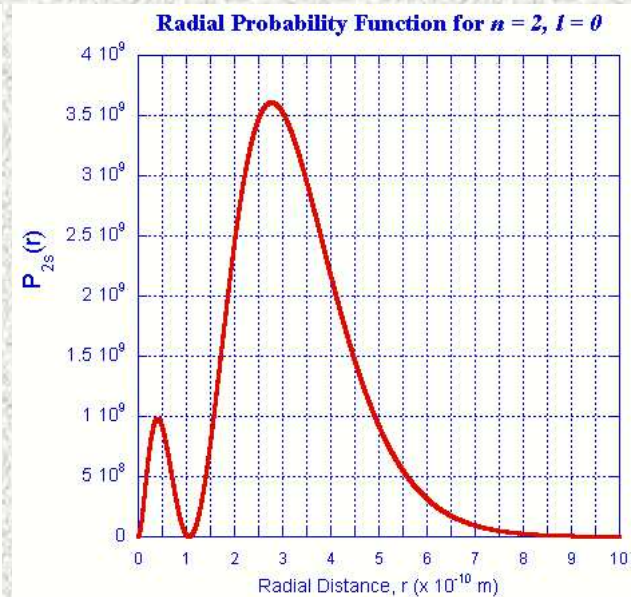
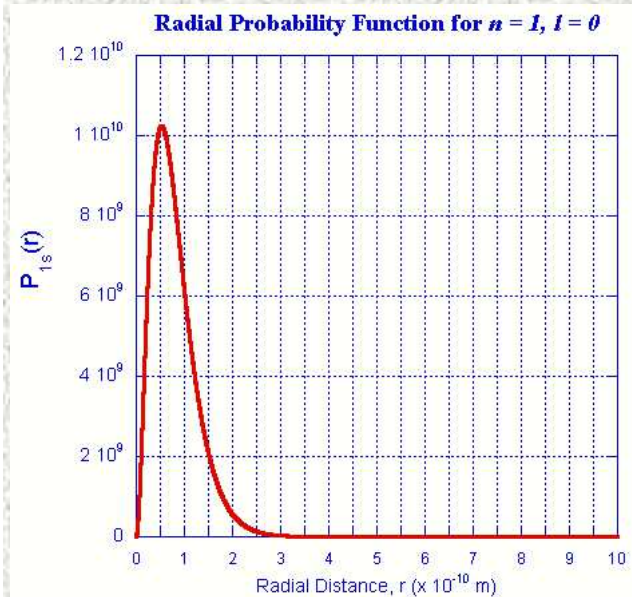
$Y_{8,6}$



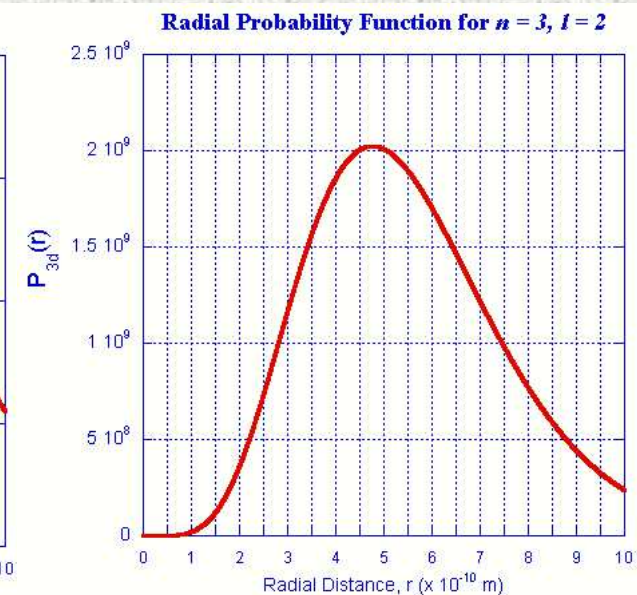
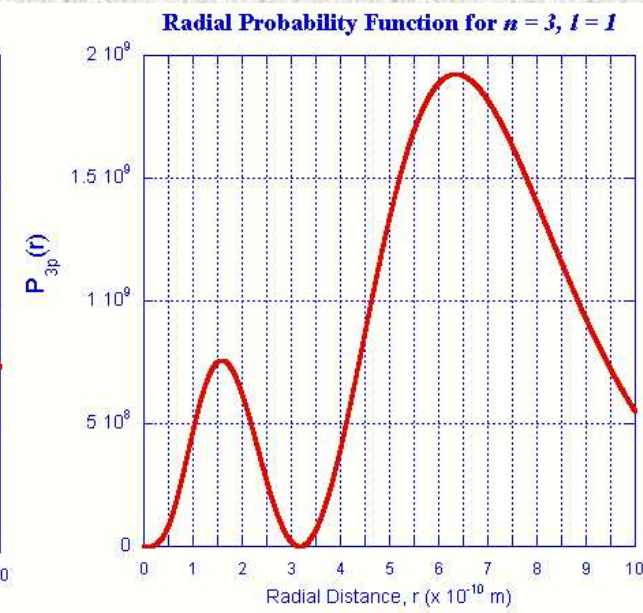
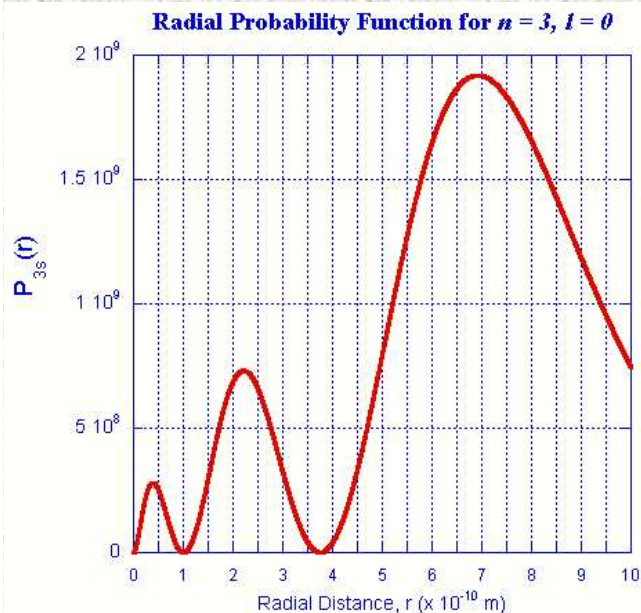
$Y_{10,6}$



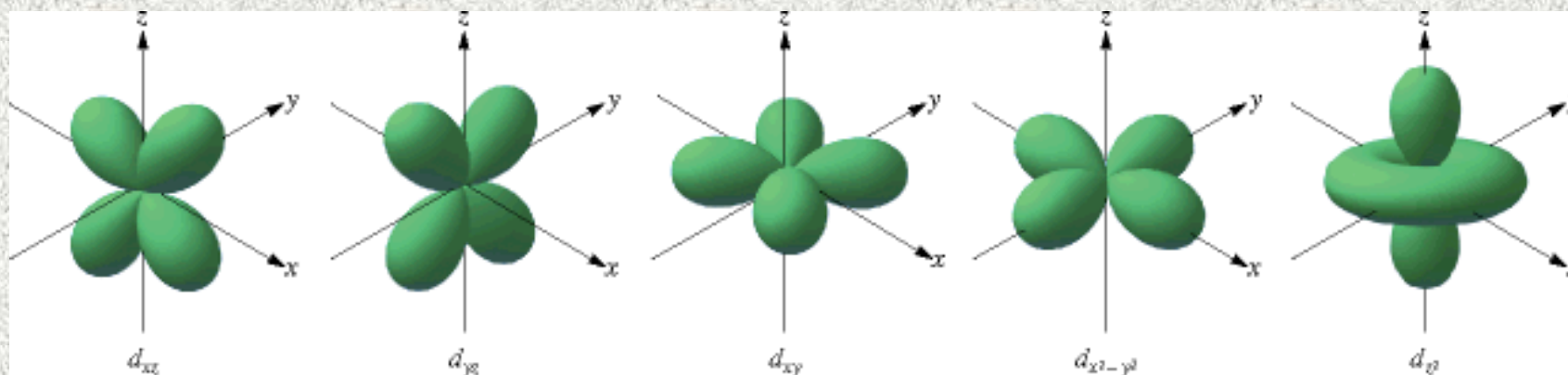
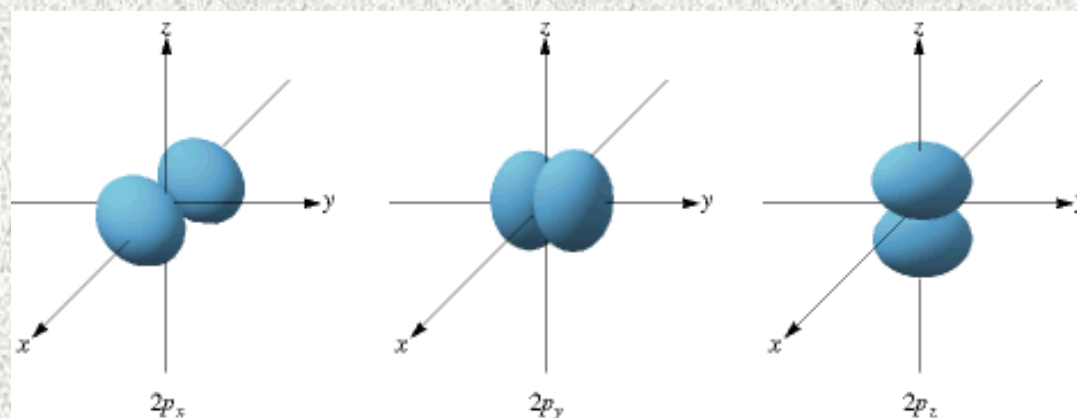
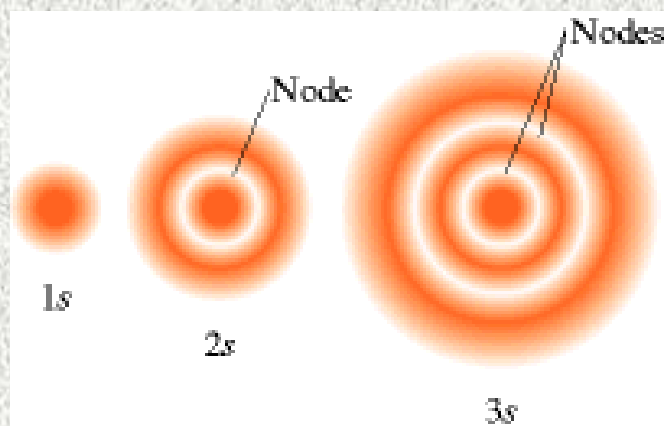
**RADIÁLNÍ
FUNKCE**
 R_{nl}



PRAVDĚPODOBNOST NALEZENÍ VE VZDÁLENOSTI r



PROSTOROVÉ ROZLOŽENÍ PRAVDĚPODOBNOSTI VÝSKYTU NALEZENÍ ELEKTRONU V ATOMU POPISUJE **ORBITÁL**



VÍCEELEKTRONOVÉ ATOMY

MODEL NEZÁVISLÝCH ELEKTRONŮ V EFEKTIVNÍM
POTENCIÁLU

NEZÁVISLOST NEBUDE ÚPLNÁ – NABÍZEJÍCÍ SE
VYJÁDŘENÍ TVARU VLNOVÉ FUNKCE

$$\Psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1) \cdot \psi_b(r_2)$$

NESPLŇUJE POŽADOVANOU SYMETRII

SPRÁVNÁ VOLBA $\Psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1) \cdot \psi_b(r_2) - \psi_a(r_2) \cdot \psi_b(r_1)$

PRO $a = b$ JE $\Psi = 0$ = **PAULIHO PRINCIP** =
V DANÉM STAVU MŮŽE BÝT MAXIMÁLNĚ 1 FERMION

EFEKTIVNÍ POTENCIÁL

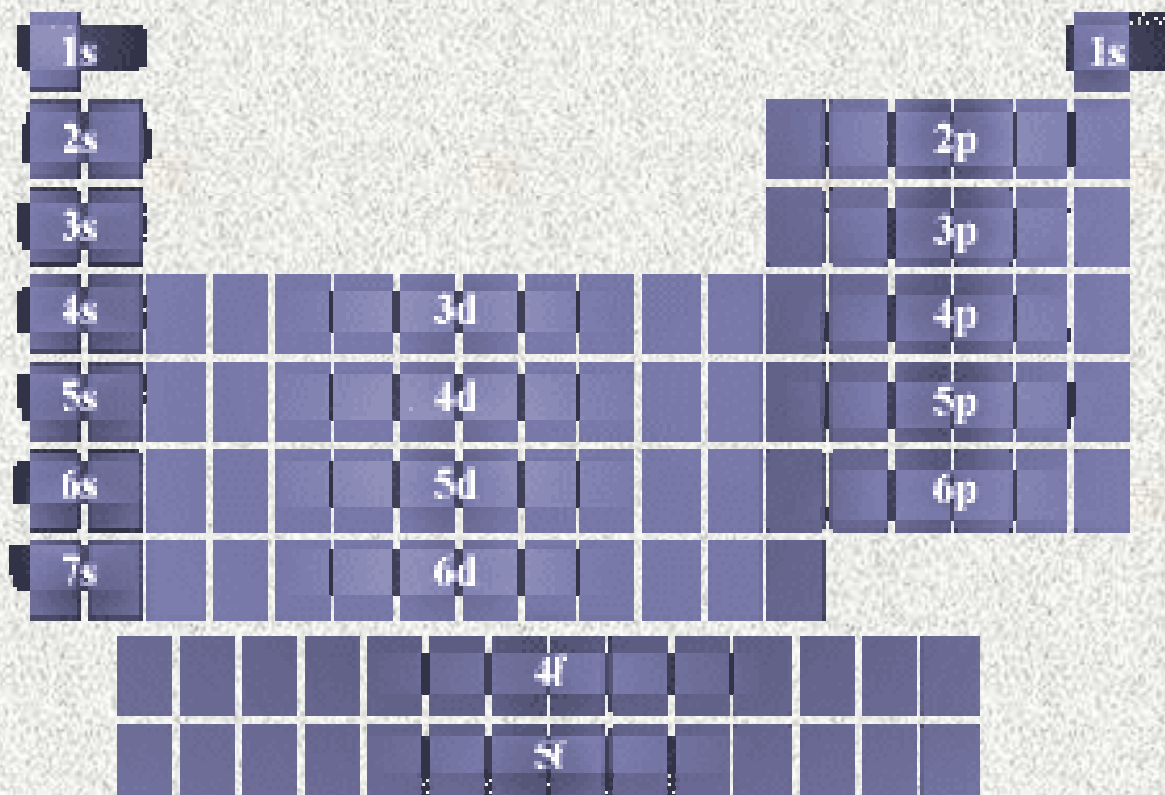
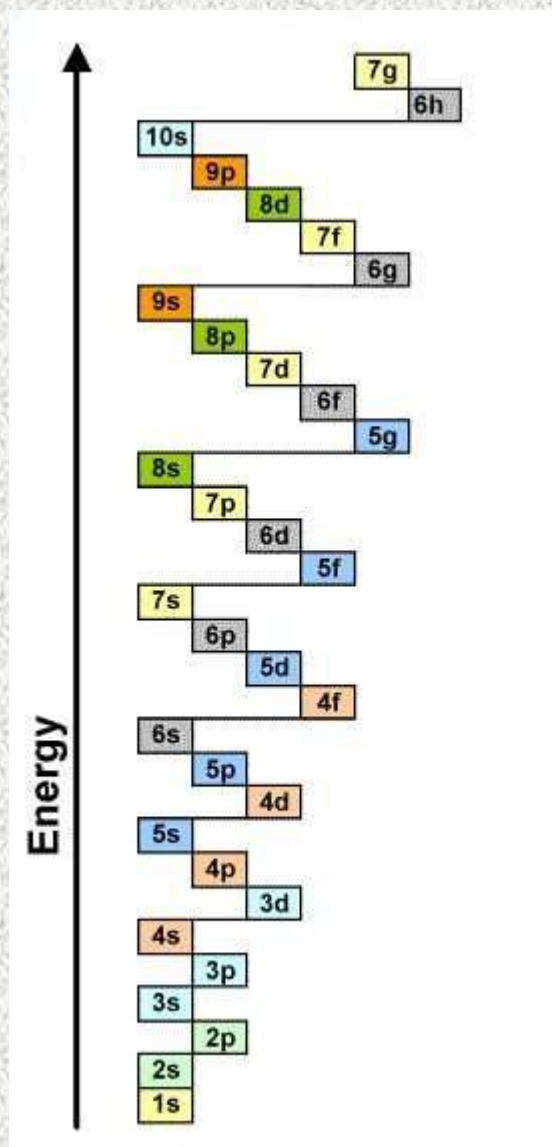
$$V = - (Z - \sigma) e^2 / 4\pi\epsilon_0 r + \beta \hbar^2 / 2mr^2$$

PARAMETR σ POPIŠUJE STÍNĚNÍ NÁBOJE JÁDRA,
DRUHÝ ČLEN DEFORMACI POTENCIÁLU DÍKY
OSTATNÍM ELEKTRONŮM

PRO ENERGII VÁZANÝCH STAVŮ DOSTANEME

$$E_n = - \frac{m(Z - \sigma)^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^{*2}}$$

KDE $n^* = n^*(n, l)$ JE ROSTOUCÍ FUNKCE /



ŘAZENÍ HLADIN A STRUKTURA PERIODICKÉ TABULKY

NA JEDNO MÍSTO MAX 2 ELEKTRONY – SPIN !

1A																	8A
1 H $1s^1$	2A											3A	4A	5A	6A	7A	2 He $1s^2$
3 Li $2s^1$	4 Be $2s^2$											5 B $2s^2 2p^1$	6 C $2s^2 2p^2$	7 N $2s^2 2p^3$	8 O $2s^2 2p^4$	9 F $2s^2 2p^5$	10 Ne $2s^2 2p^6$
11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$											13 Al $3s^2 3p^1$	14 Si $3s^2 3p^2$	15 P $3s^2 3p^3$	16 S $3s^2 3p^4$	17 Cl $3s^2 3p^5$	18 Ar $3s^2 3p^6$
19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21 Sc $3d^1 4s^2$	22 Ti $3d^2 4s^2$	23 V $3d^3 4s^2$	24 Cr $3d^5 4s^1$	25 Mn $3d^5 4s^2$	26 Fe $3d^6 4s^2$	27 Co $3d^7 4s^2$	28 Ni $3d^8 4s^2$	29 Cu $3d^{10} 4s^1$	30 Zn $3d^{10} 4s^2$	31 Ga $4s^2 4p^1$	32 Ge $4s^2 4p^2$	33 As $4s^2 4p^3$	34 Se $4s^2 4p^4$	35 Br $4s^2 4p^5$	36 Kr $4s^2 4p^6$
37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39 Y $4d^1 5s^2$	40 Zr $4d^2 5s^2$	41 Nb $4d^4 5s^1$	42 Mo $4d^5 5s^1$	43 Tc $4d^5 5s^2$	44 Ru $4d^7 5s^1$	45 Rh $4d^8 5s^1$	46 Pd $4d^{10}$	47 Ag $4d^{10} 5s^1$	48 Cd $4d^{10} 5s^2$	49 In $5s^2 5p^1$	50 Sn $5s^2 5p^2$	51 Sb $5s^2 5p^3$	52 Te $5s^2 5p^4$	53 I $5s^2 5p^5$	54 Xe $5s^2 5p^6$
55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	57 *La $5d^1 6s^2$	72 Hf $5d^2 6s^2$	73 Ta $5d^3 6s^2$	74 W $5d^4 6s^2$	75 Re $5d^5 6s^2$	76 Os $5d^6 6s^2$	77 Ir $5d^7 6s^2$	78 Pt $5d^9 6s^1$	79 Au $5d^{10} 6s^1$	80 Hg $5d^{10} 6s^2$	81 Tl $6s^2 6p^1$	82 Pb $6s^2 6p^2$	83 Bi $6s^2 6p^3$	84 Po $6s^2 6p^4$	85 At $6s^2 6p^5$	86 Rn $6s^2 6p^6$
87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	89 †Ac $6d^1 7s^2$	104 Rf $6d^2 7s^2$	105 Db $6d^3 7s^2$	106 Sg $6d^4 7s^2$	107 Bh $6d^5 7s^2$	108 Hs $6d^6 7s^2$	109 Mt $6d^7 7s^2$	110	111	112	Unknown	114	Unknown	††116	Unknown	††118

* 58 Ce $4f^2 6s^2$	59 Pr $4f^3 6s^2$	60 Nd $4f^4 6s^2$	61 Pm $4f^5 6s^2$	62 Sm $4f^6 6s^2$	63 Eu $4f^7 6s^2$	64 Gd $4f^7 5d^1 6s^2$	65 Tb $4f^9 6s^2$	66 Dy $4f^{10} 6s^2$	67 Ho $4f^{11} 6s^2$	68 Er $4f^{12} 6s^2$	69 Tm $4f^{13} 6s^2$	70 Yb $4f^{14} 6s^2$	71 Lu $4f^{14} 5d^1 6s^2$
† 90 Th $6d^2 7s^2$	91 Pa $5f^2 6d^1 7s^2$	92 U $5f^3 6d^1 7s^2$	93 Np $5f^4 6d^1 7s^2$	94 Pu $5f^6 7s^2$	95 Am $5f^7 7s^2$	96 Cm $5f^7 6d^1 7s^2$	97 Bk $5f^9 7s^2$	98 Cf $5f^{10} 7s^2$	99 Es $5f^{11} 7s^2$	100 Fm $5f^{12} 7s^2$	101 Md $5f^{13} 7s^2$	102 No $5f^{14} 7s^2$	103 Lr $5f^{14} 6d^1 7s^2$

VÝSLEDNÁ PERIODICKÁ TABULKA

**PŘI PŘECHODU ELEKTRONU ATOMU Z VYŠŠÍ
HLADINY NA NIŽŠÍ JE EMITOVÁN FOTON,
JEHOŽ ENERGIE ODPOVÍDÁ ROZDÍLU ENERGIÍ
HORNÍ A DOLNÍ HLADINY.**

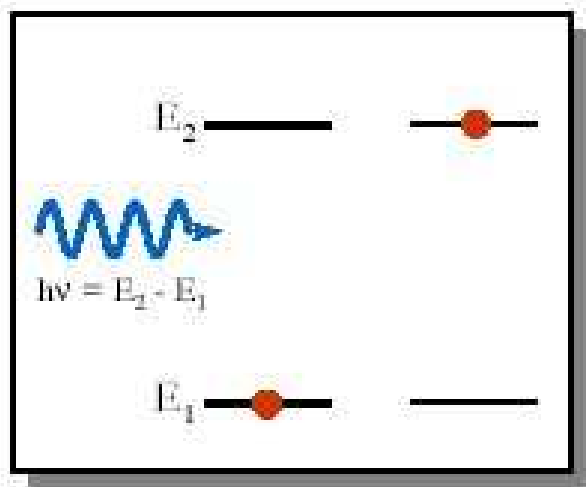
**PŘI ABSORPCI FOTONU JE ELEKTRON
Z POČÁTEČNÍ HLADINY EXCITOVÁN DO VYŠŠÍ
NEBO DOKONCE DOCHÁZÍ K IONIZACI ATOMU.**

**VÝBĚROVÁ PRAVIDLA URČUJÍ KTERÉ
PŘECHODY JSOU PRAVDĚPODOBNÉ
A KTERÉ NE
(tzv. DOVOLENÉ A ZAKÁZANÉ PŘECHODY)**

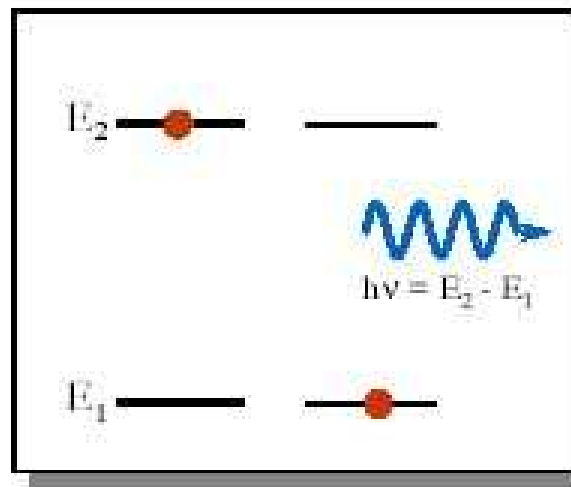
PŘECHODY ELEKTRONU MEZI DVĚMA HLADINAMI

$$dn_1/dt = -dn_2/dt = -B_{12}n_1u(\omega) + A_{21}n_2 + B_{21}n_2u(\omega)$$

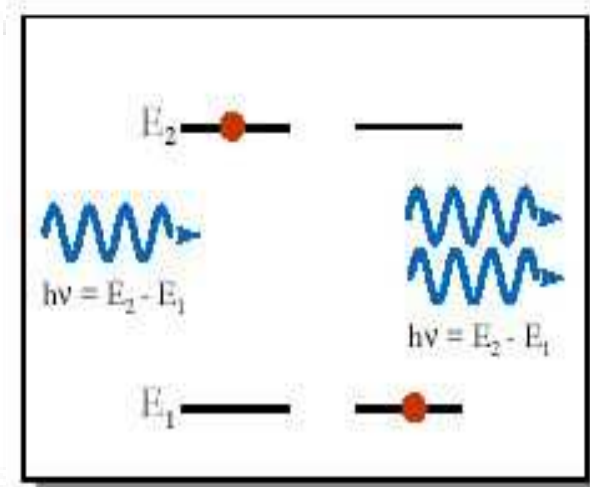
n_i = OBSAZENÍ HLADIN, A a B EINSTEINOVY KOEFICIENTY, $u(\omega)$ = HUSTOTA ENERGIE ZÁŘENÍ



ABSORPCE



**EMISE
SAMOVOLNÁ**



**EMISE
VYNUCENÁ**

DOPOČET :

V ROVNOVÁZE JE $dn_1/dt = -dn_2/dt = 0$,

TAKŽE $B_{12}n_1u(\omega) = A_{21}n_2 + B_{21}n_2u(\omega)$,

ODKUD $u(\omega) = A_{21} / (B_{12}n_1/n_2 + B_{21})$.

V ROVNOVÁZE (BOLTZMANN) : $n_1 / n_2 = \exp(\hbar\omega/k_B T)$

TAKŽE $u(\omega) = A_{21} / (B_{12}\exp(\hbar\omega/k_B T) + B_{21})$.

**PŘI $B_{12} = B_{21}$ A $A_{21} = B_{21}\hbar\omega^3 / \pi^2 c^3$ DOSTANEME
PLANCKOVO ROZDĚLENÍ !**

VYNUCENOU EMISI VYUŽÍVAJÍ LASERY

LIGHT AMPLIFICATION BY STIMULATED EMISSION OF RADIATION

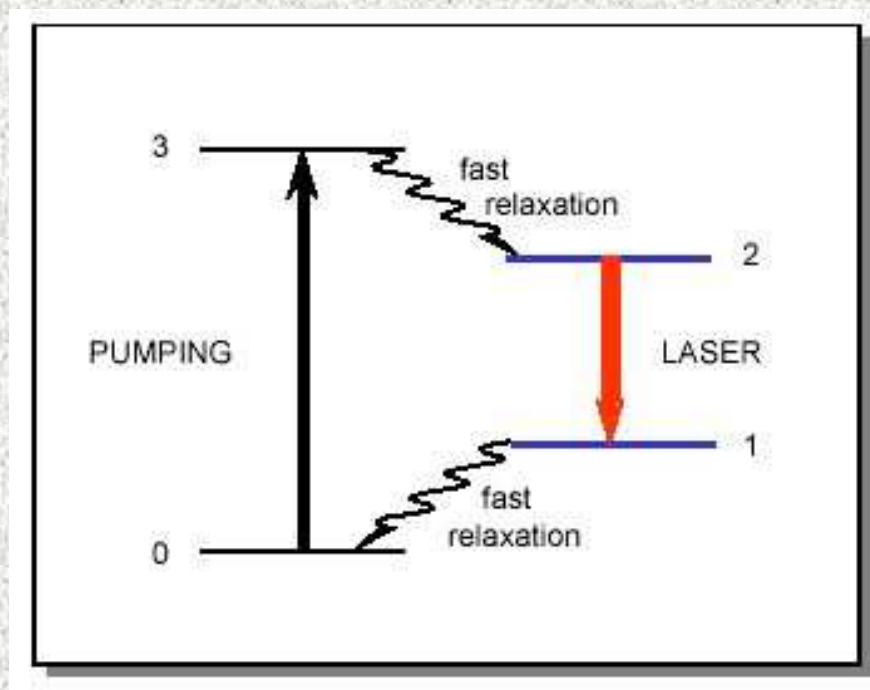
POTŘEBUJEME :

**AKTIVNÍ PROSTŘEDÍ
(TAM LZE DOSÁHNOUT INVERZNÍ POPULACI =
VYŠŠÍ OBSAZENÍ HORNÍ HLADINY)**

**ZDROJ ENERGIE
UMOŽŇUJÍCÍ ČERPÁNÍ ELEKTRONŮ DO HORNÍ
HLADINY**

**DUTINOVÝ REZONÁTOR
VYBÍRÁ VLNOVOU DÉLKU ZESILOVANÉHO
ZÁŘENÍ**

ČTYŘHLADINOVÉ SCHÉMA



FUNKCE REZONÁTORU





DIODOVÝ LASER

**NEODYMOVÝ
LASER**



METODY ČERPÁNÍ :

ELEKTRICKÝ VÝBOJ

HeNe, Ar⁺, CO₂ LASER

ABSORPCE SVĚTLA

RUBÍNOVÝ LASER (VÝBOJKA)

NEODYMOVÉ SKLO (VÝBOJKA)

BARVIVOVÉ LASERY (LASER)

CHEMICKÁ REAKCE

HF LASER, EXCIMERNÍ LASER (XeF)

ELEKTRICKÝ PROUD

POLOVODIČOVÝ LASER (AlGaAs)

OBŘÍ MIKROVLNNÝ **MASER**)*



**MOLEKULÁRNÍ MRAKY
ČERPANÉ HORKOU
MLADOU HVĚZDOU**

**NEJBĚŽNĚJŠÍ
MOLEKULY VYKAZUJÍCÍ
MASEROVÁNÍ :**

OH, H₂O, CH₃OH, SiO

**TYPICKÉ ZESÍLENÍ 100 ×
ŠPIČKOVÉ I 1000 ×**

)* Maser je analogie laseru, jen pracující v mikrovlnné oblasti.

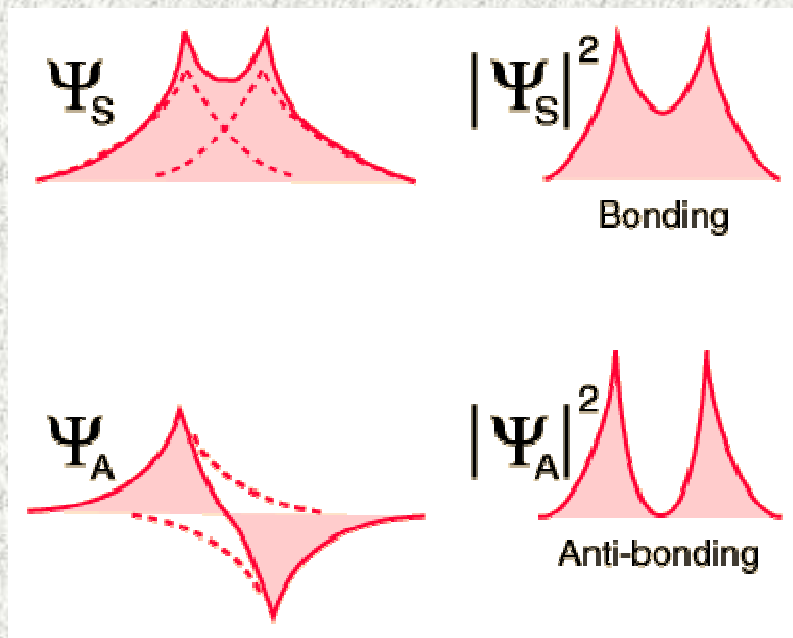
MOLEKULY

„JEN“ SLOŽITĚJŠÍ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE.

**POLOHY JADER CHÁPEME JAKO PARAMETRY –
PAK HLEDÁME MINIMUM ENERGIE SYSTÉMU
(BORNOVA-OPPENHEIMEROVA APROXIMACE)**

**ATOMOVÉ ORBITÁLY JSOU NAHRAZENY
MOLEKULÁRNÍMI.**

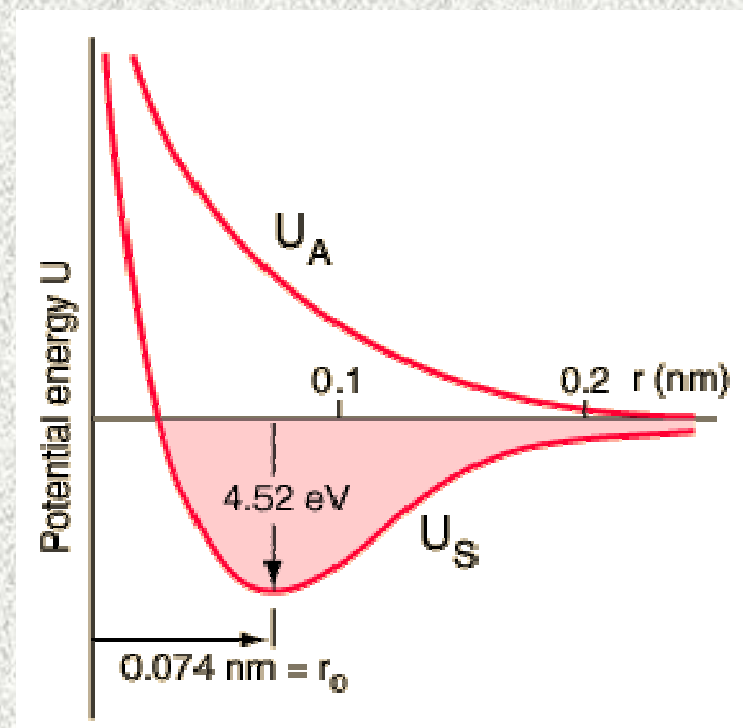
**V METODĚ LCAO SESTROJUJEME MOLEKULÁRNÍ
ORBITÁLY JAKO LINEÁRNÍ KOMBINACE
ATOMÁRNÍCH.**



**PRO VODÍK VOLÍME
SOUČTOVÝ A
ROZDÍLOVÝ ORBITÁL
(σ RESP. σ^*)**

**Z ENERGETICKÉ ZÁVISLOSTI
VYPLÝVÁ, ŽE ORBITÁL σ JE
VAZEBNÍ A σ^* ANTIVAZEBNÍ.**

**V MOLEKULE H_2 JSOU OBA
ELEKTRONY V ORBITÁLU σ
A MAJÍ OPAČNÝ SPIN.**



KOVALENTNÍ VAZBA

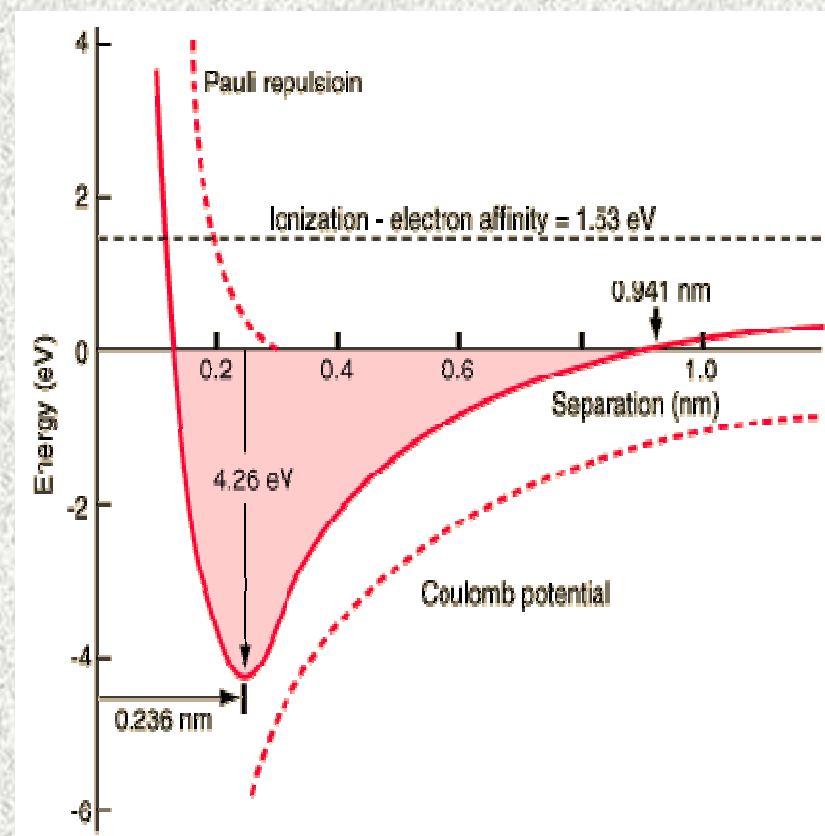
IONTOVÁ VAZBA JDE SKORO KLASICKY :

NaCl :

**KATION Na^+ (ztráta 5.14 eV),
ANION Cl (zisk 3.62 eV),
COULOMBOVSKÉ
PŘITAHOVÁNÍ (6.10 eV),
PAULIOVSKÉ ODPUZOVÁNÍ
(- 0.31 eV)**

**DISSOCIAČNÍ ENERGIE JE
PROTO 4.27 eV .**

**VZDÁLENOST JADER VYJDE
0.236 nm .**



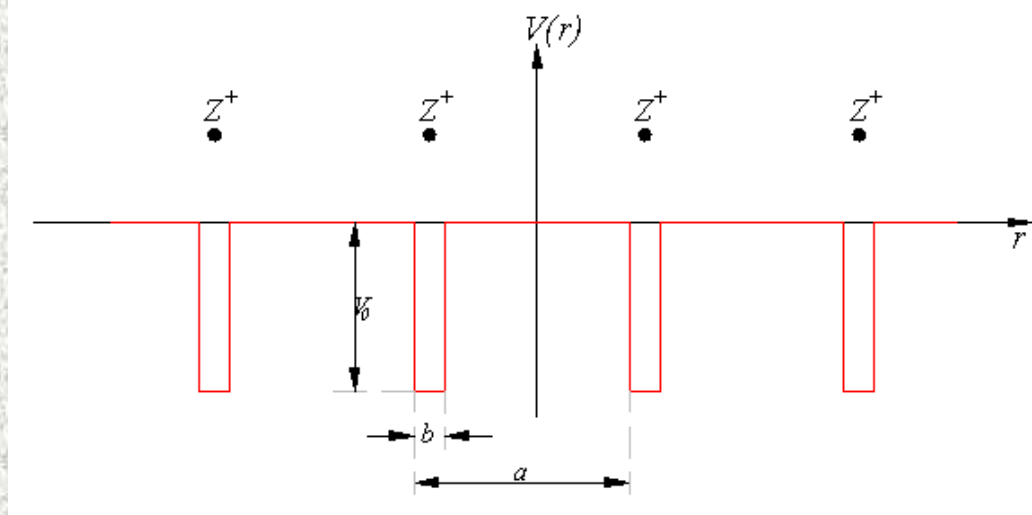
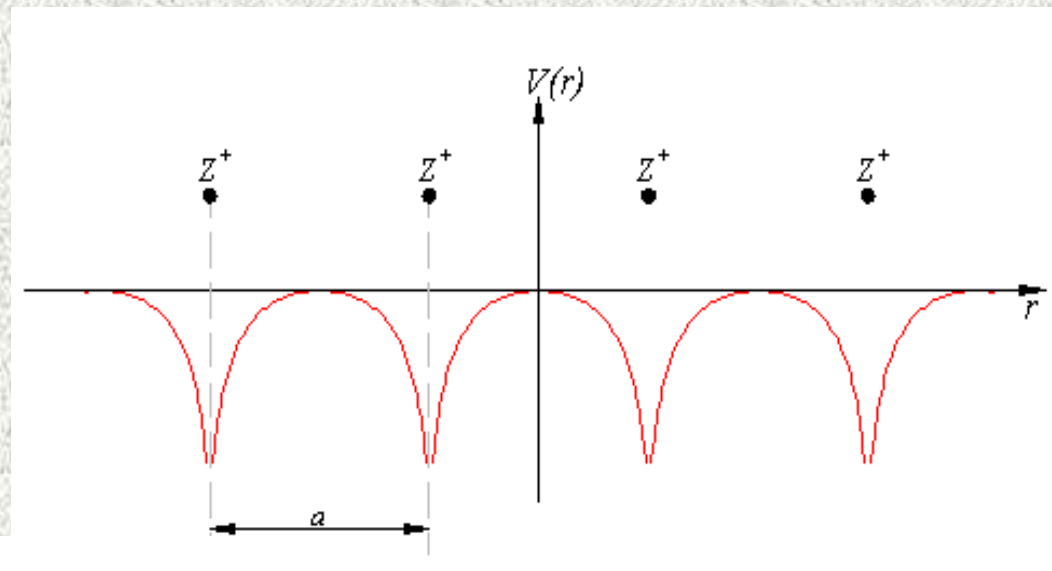
KONEC NEZÁVISLÉ CHEMIE ?!

THE UNDERLYING PHYSICAL LAWS NECESSARY FOR THE MATHEMATICAL THEORY OF A LARGE PART OF PHYSICS AND **THE WHOLE OF CHEMISTRY** ARE THUS COMPLETELY KNOWN, AND THE DIFFICULTY IS ONLY THAT THE EXACT APPLICATIONS OF THESE LAWS LEADS TO EQUATIONS MUCH TOO COMPLICATED TO BE SOLUBLE.

P.A.M. DIRAC

PEVNÁ LÁTKA – 1D MODEL

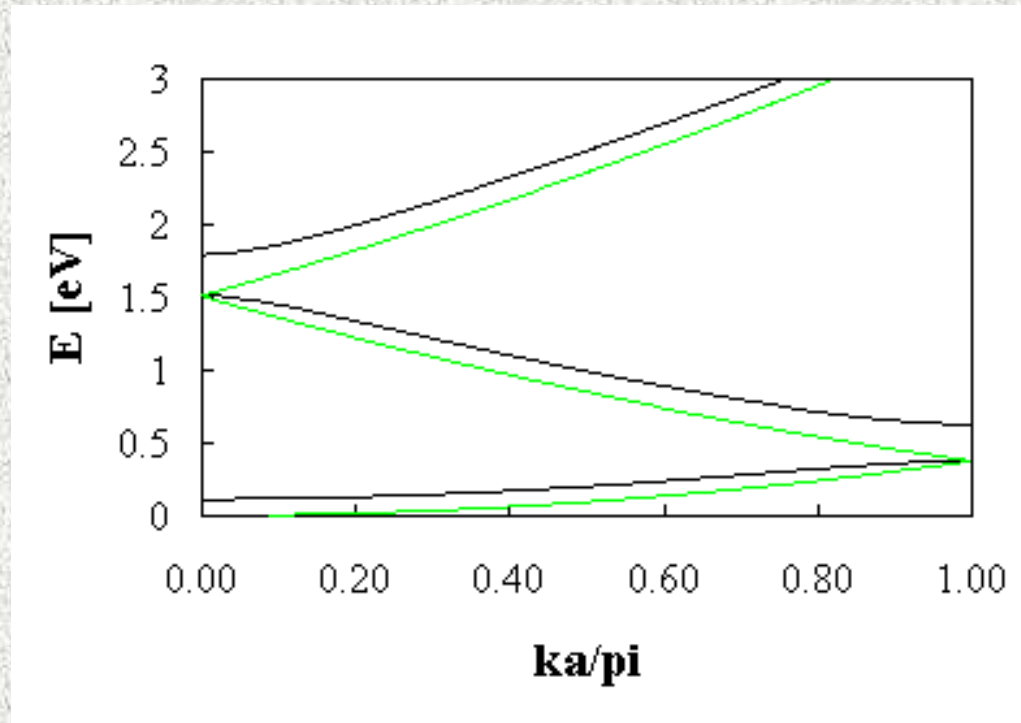
REÁLNÝ
POTENCIÁL



PŘIBLIŽNÝ
POTENCIÁL
KRONIG --
PENNEY

ŘEŠENÍ MAJÍ TZV. BLOCHŮV TVAR

$$\psi_k = \exp(ikx) \cdot u_k(x), \quad u_k(x) - \text{periodická}$$



ZELENĚ VOLNÉ ELEKTRONY

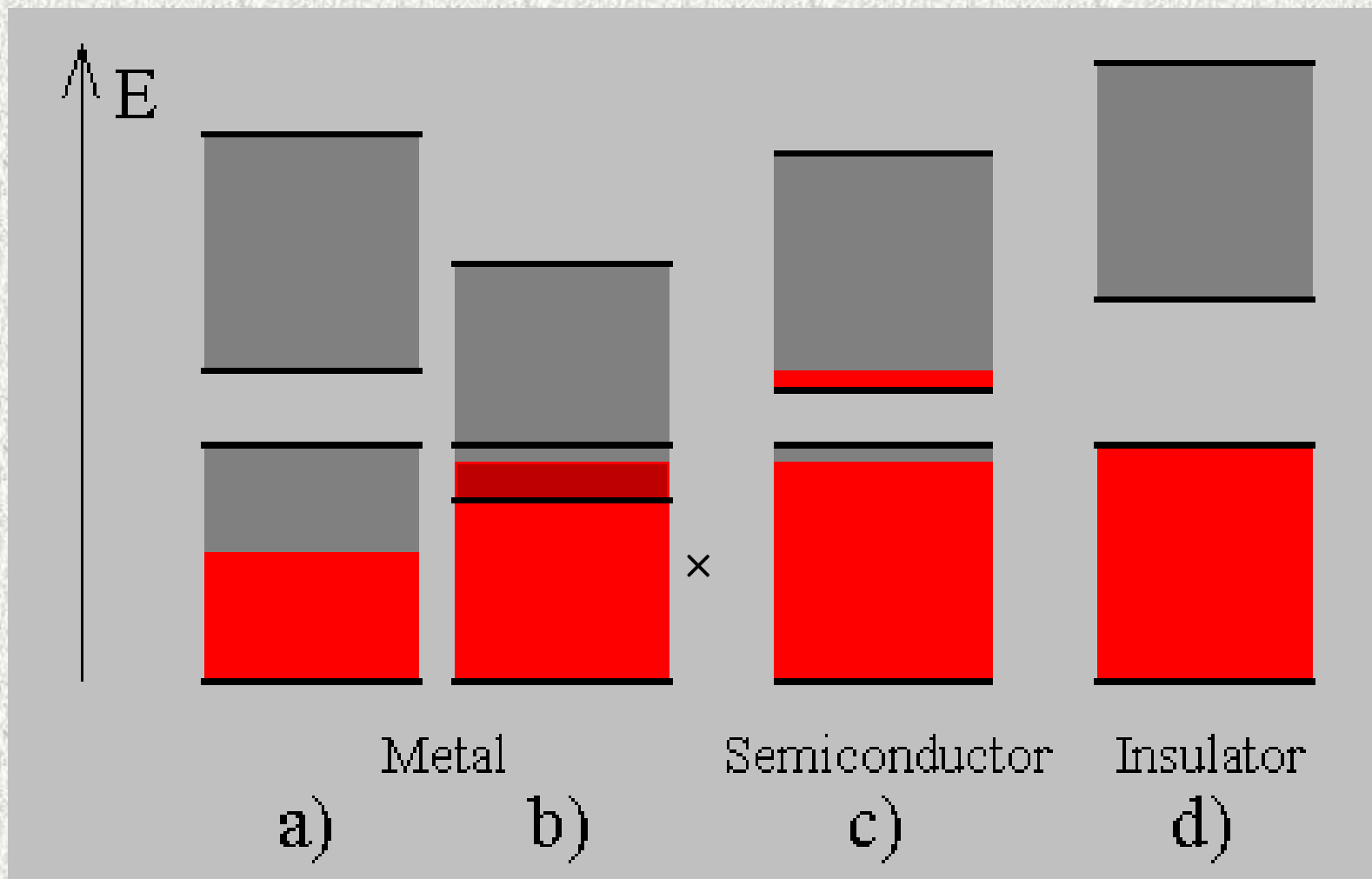
ENERGIE ZÁVISEJÍ NA VLNOVÉM ČÍSLE k A TVOŘÍ PÁSY – JE TEDY $E = E_n(k)$, n = ČÍSLO PÁSU

**V KAŽDÉM PÁSU JE N STAVŮ (N = POČET ATOMŮ),
V KAŽDÉM MOHOU BÝT 2 ELEKTRONY (SPIN).**

PÁSY SE ZAPLŇUJÍ OD SPODA AŽ PO FERMIHO MEZ.

**ZCELA ZAPLNĚNÉ PÁSY A ZCELA PRÁZDNÉ PÁSY
NEPŘÍSPÍVAJÍ K VODIVOSTI.**

**OBSAZENÍ PÁSŮ ROZHODUJE, ZDA LÁTKA JE
KOV NEBO IZOLANT, PŘÍPADNĚ POLOVODIČ.**



**JEDNODUCHÉ SCHÉMA VYSVĚTLUJE ROZDÍL
VODIVOSTÍ KOVU A IZOLANTU O 20 ŘÁDŮ**