

POŽADAVKY ATOMOVKA

Vypracoval Iosephus Kučeravý

• DEFINOVAT A VE SPRÁVNÝCH SOUVISLOSTECH POUŽÍT NÁSLEDUJÍCÍ TERMÍNY

- *SYMETRIE* = „souměrnost“¹,
symetrický objekt je invariantní vůči speciálním geometrickým transformacím - operacím symetrie

■ *PRVEK A OPERACE SYMETRIE*

PRVEK SYMETRIE	Symbol	OPERACE SYMETRIE	Symbol
rovina zrcadlení	σ	zrcadlení, reflexe	Σ
střed inverse	i	inverse	I
(vlastní) osa rotace	c_n	rotace kolem c_n	C_n
nevlastní osa rotace	s_n	rotace kolem s_n s následnou reflexí na rovině kolmé k s_n	S_n
		identita	E

Indexy v rovinách zrcadlení $\sigma_v, \sigma_h, \sigma_d$ určují jejich orientaci (vertikální, horizontální, dihedrální)

■ *BODOVÁ A PROSTOROVÁ GRUPA*

► grupa = „svazek množiny a binární operace na ní“

Kde binární operace musí splňovat:

- 1) pro $a, b \in G$, ab taky $\in G$... je definováno násobení prvků (uzavřenost grupy)
- 2) $(ab)c = a(bc)$... asociativita násobení prvků
- 3) $ea = a$ pro $\forall a \in G$... existence jednotkového prvku (E)
- 4) $a^{-1}a = e$ pro $\forall a \in G$... existence inverzního prvku (a^{-1})

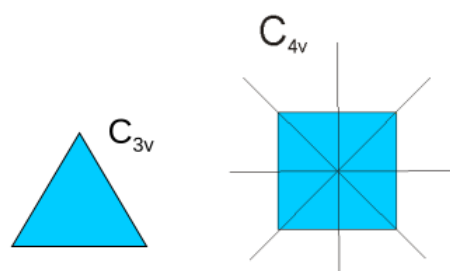
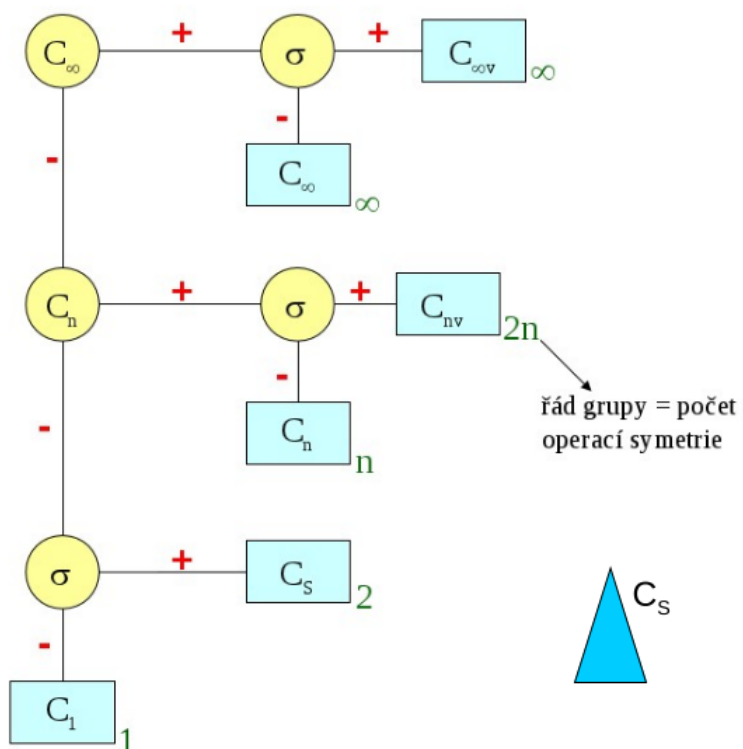
► bodová grupa: nechává alespoň jeden bod v prostoru nehybný²

BODOVÁ GRUPA	Prvky symetrie	Prvky symetrie (název)
C_1	E	identita
C_i	i	střed inverse
C_s	σ	rovina zrcadlení
C_n	C_n	rotace kolem n-četné osy c_n
C_nv	$C_n + n\sigma_v$	C_n složená s n-násobným vertikálním zrcadlením
C_nh	$C_n + \sigma_h$	C_n složená s n-násobným horizontálním zrcadlením
D_n	$C_n + nC_2$	C_n složená s n-násobnou rotací podle C_2 kolmé na C_n
D_nh	$D_n + n\sigma_v + \sigma_h$	D_n složená s n-násobným vertikálním zrc. a s horizontálním zrc.
D_nd	$D_n + n\sigma_d$	D_n složená s n-násobným dihedrálním zrcadlením
T_d		molekula má symetrii tetraedru
O_h		molekula má symetrii krychle nebo oktaedru
T_d		molekula má symetrii koule

¹Daniš, str. 104

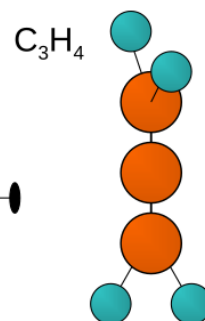
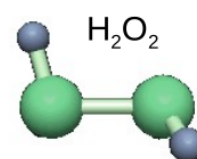
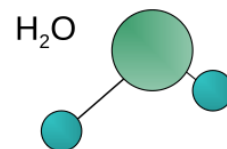
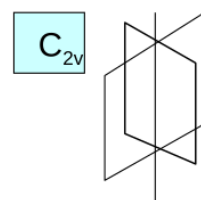
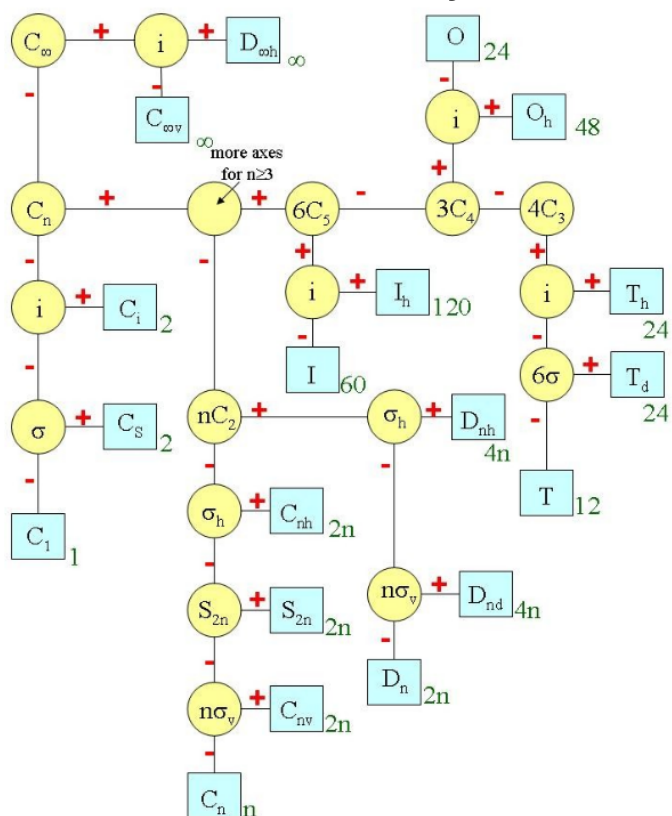
²Daniš, str. 108

Symetrie molekul ve 2D

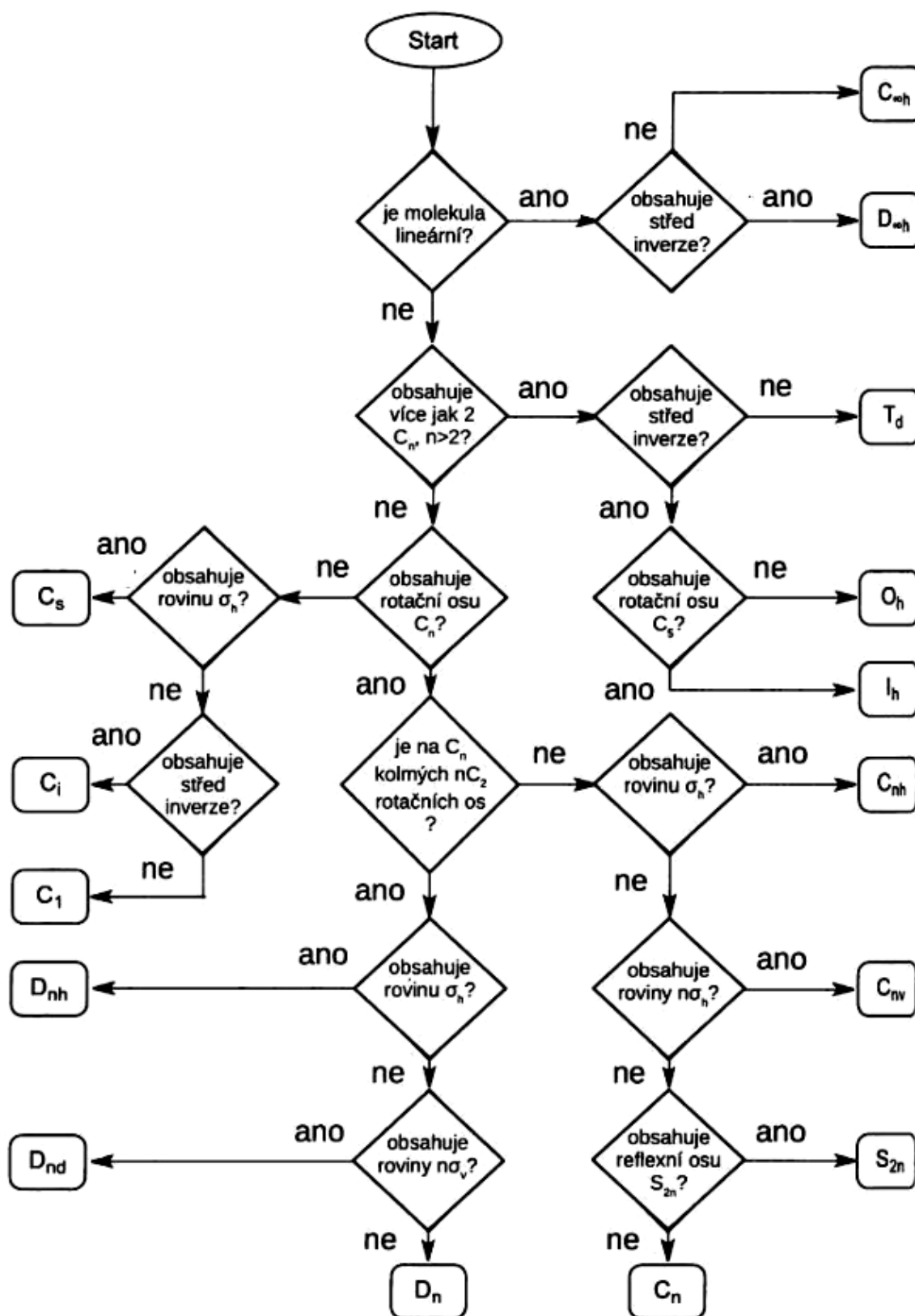


Od molekúl k pevnej látke

Symetrie molekul ve 3D



-42m



► prostorová grupa: popisuje symetrii krystalů³

Prvky a operace symetrie obohaceny o translaci (opakování elementárního motivu přesunováním + operacemi symetrie)

³Daniš, str. 156

■ **CHIRALITA** = „stranová (levo-pravá) vyhraněnost“ molekulárních isomerů

- isomery: sloučeniny stejného sumárního vzorce a hmotnosti, ale rozdílné STRUKTURY-VLASTNOSTÍ
- Pozn.: Chirální sloučenina NEMÁ rovinu ani střed symetrie!

■ **ENANTIOMER**

Levá (L) či pravá (D) modifikace (forma) isomeru, objeveno Pasteurem⁴, v přírodě převažují leváci

- optické enantiomery: stáčí rovinu polarisovaného světla

■ **RACEMÁT**

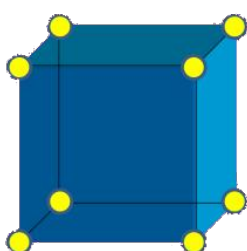
Směs optických enantiomerů L a D v poměru 1:1 → výsledný roztok tak nestáčí rovinu polarisovaného světla

■ **ELEMENTÁRNÍ BUŇKA**

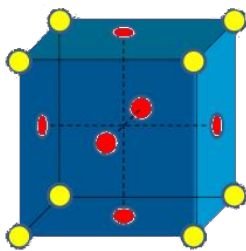
Nejmenší jednotka krystalické struktury.

Podle obsazení krystalické mřížky se dělí na:

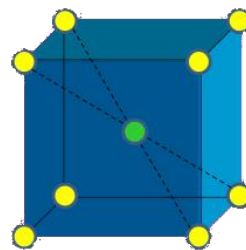
- prosté (primitivní) buňky SC
 - mřížové body jsou jen v rozích hran (minimální objem)
- centrované buňky
 - více mřížových bodů na buňku (násobný objem)
 - ▷ plošně centrované buňky FC - mřížové body jsou v rozích hran a ve středech stěn
 - ▷ prostorově centrované buňky BC - mřížové body jsou jen v rozích hran a jeden je v průsečíku tělesových úhlopříček



SCC - primitivní kubická mříž



FCC - plošně centrovaná



BCC - prostorově centrovaná

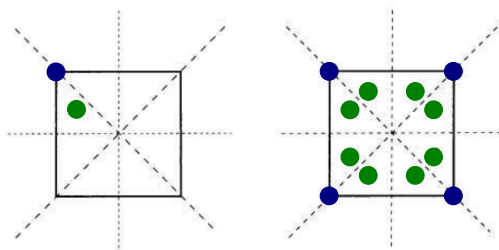
■ **KRYSTALOVÁ MŘÍŽ** = „lešení atomu“

Množina abstraktních bodů, pomocí nichž se popisuje struktura krystalu. Vystihuje translační periodicitu krystalické struktury.

- struktura krystalu = prostorové uspořádání atomů v krystalu (mříž+hmotná báze)
- elementární mříž = základní geometrický motiv, jehož opakováním získáme krystalovou mříž

■ **HMOTNÁ BÁZE** = způsob, jakým jsou v krystalické mříži rozmístěny atomy⁵

Pozor! Atomy nelze z důvodů symetrie elementární mřížky umístit do mřížky libovolně!



Obrázek 3.10: Symetrické polohy ve čtvercové mřížce. Operace symetrie zobrazí atomy umístěné do poloh na levém obrázku do všech symetricky ekvivalentních poloh – obrázek vpravo.

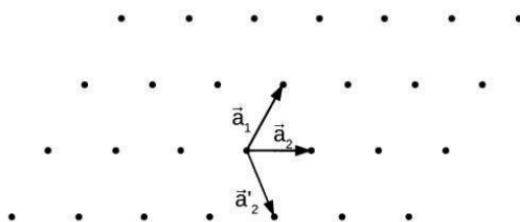
⁴Daniš, str. 101

⁵Daniš, str. 164

■ BRAVAISOVA MŘÍŽ

Nekonečná řada diskrétních (mřížových) bodů generovaná pomocí celočíselných lineárních kombinací vektorů elementární mříže

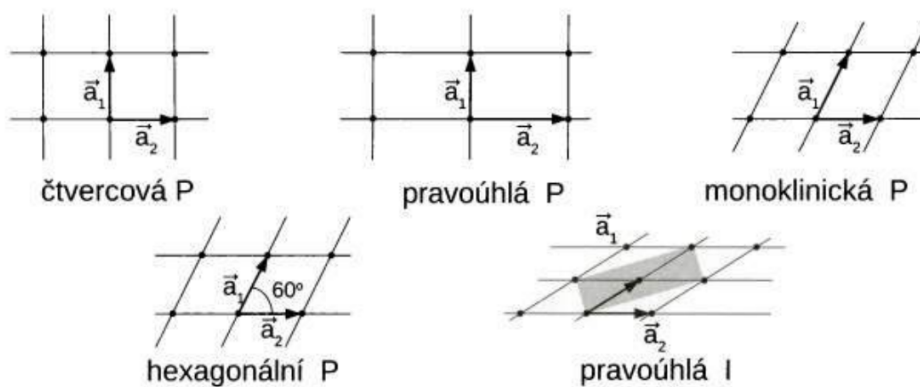
Ve 2D:



Obrázek 3.3: Volba elementární mříže pomocí vektorů $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ a $\vec{a}'_2$.

Souřadnice každého z bodů na obrázku 3.3 lze zapsat pomocí lineární kombinace vektorů elementární mříže,

$$\vec{R} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad \text{nebo} \quad \vec{R} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}'_2, \quad n, m \in \mathbb{Z}. \quad (3.2)$$



Obrázek 3.4: Pět Bravaisových mříží ve 2D.

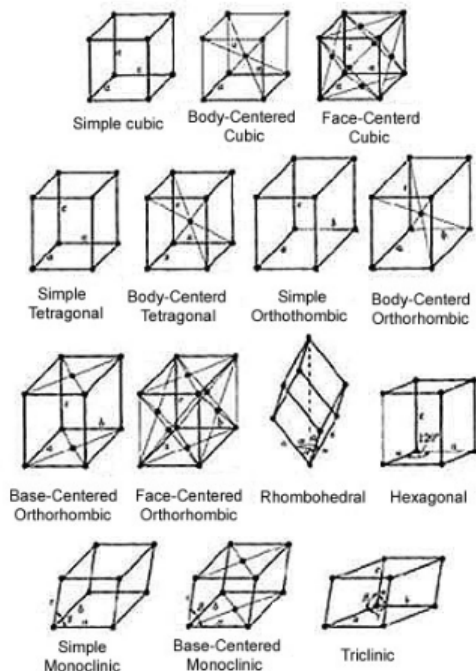
	2D	3D
krystalografické třídy	4	7
Bravaisovy mříže	5	14
bodové grupy mříží	10	32
prostorové grupy	17	230

Ve 3D:

$$\vec{R} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + p\vec{a}_3 \quad m, n, p \in \mathbb{Z}$$

popis symetrie

Bravaisovy mřížky ve 3D



$$a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma$$

triklinická soustava $P \quad C_i$

$$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$$

monoklinická $P, A \quad C_{2h}$

$$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

ortorombická $P, A, I, F \quad D_{2h}$

$$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

hexagonální $P \quad D_{6h}$

$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$$

trigonální $R \quad D_{3d}$

$$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

tetragonální $P, I \quad D_{4h}$

$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

kubická $P, I, F \quad O_h$

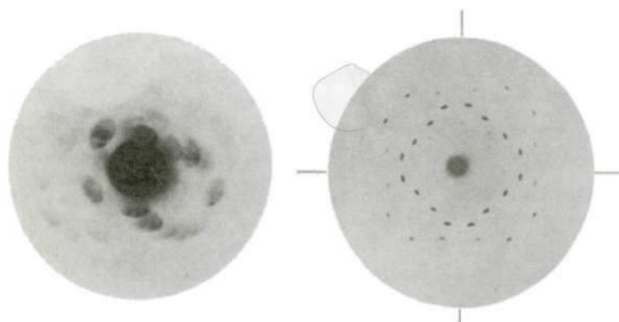
Platí: Každá prázdná mřížka různého typu příslušející dané soustavě, je Bravaisova mřížka

■ **TRANSLAČNÍ SYMETRIE** = invariance fyzikálních vlastností a struktury krystalu při periodickém posouvání elementární buňky

■ **DIFRAKCE** = „ohyb vlnění/záření“

Využívá se pro nepřímé zkoumání periodicity uspořádání atomů v krystalických látkách

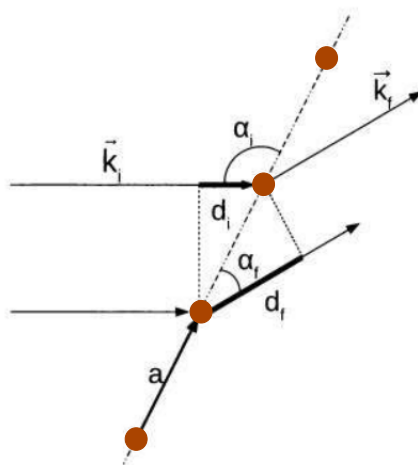
Pro pozorování difrakce potřebujeme použít vlnovou délku záření srovnatelnou s rozměry atomů, což jsou $\sim \text{\AA}$, tedy potřebujeme rentgenové záření



Obrázek 3.25: První záznam ohybu rtg. paprsků na krystalu (vlevo), vpravo záznam ohybu rtg. paprsků na krystalu ZnS. Převzato z [48].

■ DIFRAKČNÍ PODMÍNKY⁶

► Laueho difrakční podmínky



Obrázek 3.26: Jednorozměrný řetízek atomů s periodou $\vec{a}$.

Záření dopadá na řetízek atomů s periodou $\vec{a}$ pod úhlem α_i a vychází pod úhlem α_f

Směr záření je popsán vlnovými vektory $\vec{k}_i$ (dopadající), $\vec{k}_f$ (odražený) paprsek

Velikost vlnových vektorů: $|\vec{k}_{i,f}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

Klíčová myšlenka:

Abychom pozorovali nenulovou intenzitu záření ve směru $\vec{k}_f$, potřebujeme splnit podmínku konstruktivní interference

$\Rightarrow$ dráhový rozdíl paprsků $d_f - d_i =$ celočíselný násobek vlnové délky λ

$$d_f - d_i = h\lambda$$

$$\frac{\vec{a} \cdot (\vec{k}_f - \vec{k}_i)}{\underbrace{|\vec{k}_f|}_{2\pi/\lambda}} = h\lambda$$

$$\vec{a} \cdot \vec{q} = 2\pi h \quad \text{kde } \vec{q} \text{ je tzv. rozptylový vektor, } h \in \mathbb{Z}$$

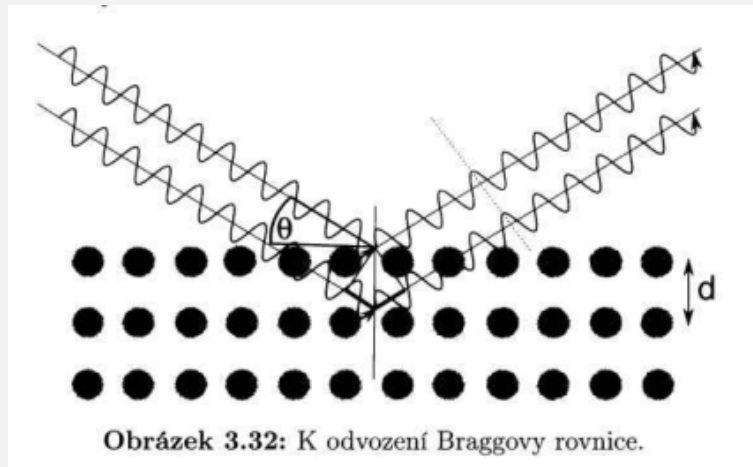
VE 3D máme krystalickou mřížku definovanou třemi vektory: $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ a pro každý z nich musí být splněna podmínka konstruktivní interference, tedy dostaneme:

$$\left. \begin{aligned} \vec{a}_1 \cdot \vec{q} &= 2\pi h \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{q} &= 2\pi k \\ \vec{a}_3 \cdot \vec{q} &= 2\pi l \end{aligned} \right\} h, k, l \in \mathbb{Z}$$

Laueovy rovnice však řeší pouze směr difraktovaného záření, **neřeší intenzitu difraktovaných paprsků!!**

⁶Daniš, str. 185

► Braggovy difrakční podmínky



Rentgenové záření dopadá na roviny atomů s **mezirovinnou vzdáleností** d pod **úhlem** θ a vychází **pod stejným úhlem** (tzv. symetrická difrakce na odraz)

Klíčová myšlenka:

Spodní paprsek musí oproti hornímu urazit delší vzdálenost (tlustá čára je vzdálenost navíc):

$$l = 2d \sin(\theta)$$

Opět musí platit podmínka konstruktivní interference, která má nyní tvar:

$$2d \sin(\theta) = n\lambda \quad \lambda \text{ vlnová délka použitého záření, } n \in \mathbb{Z}$$

Číslo n je řád difrakčního maxima. Tato rovnice umožňuje určit periodu d difrakční mřížky (tzv. mřížkovou konstantu).

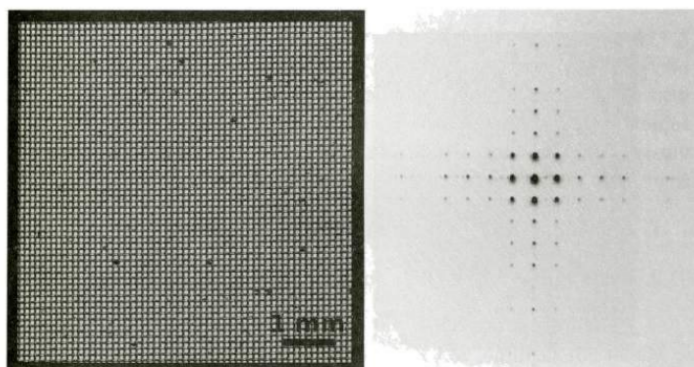
Braggova rovnice má pak tvar

$$2d_{h,k,l} \sin(\theta) = \lambda$$

kde $d_{h,k,l}$ značí mezirovinnou vzdálenost rovin s indexy hkl (v přímém prostoru)

Opět však řeší pouze směr difraktovaného záření, **neřeší intenzitu difraktovaných paprsků!!**

■ *RECIPROKÝ PROSTOR* = „převrácený prostor“



Obrázek 3.27: Difrakce na mřížce – kovovém sítku (vlevo), difrakční obrazec po osvětlení laserovým ukazovátkem (vpravo).

Z matematického hlediska odpovídá difrakční obrazec Fourierově transformaci objektu, na kterém dochází k ohybu.

Symetrie původního objektu je v difrakčním obraze zachována.

Difrakční obrazec zobrazuje pouze to, co se v přímém obraze pravidelně opakuje, **souřadnice** bodů na difrakčním snímku tak odpovídají **frekvenci** opakování nějakého motivu.

Platí:

- Délky stran elementární buňky v přímém a v difrakčním obraze jsou **nepřímo úměrné**
- Poloha bodu v difrakčním obraze je dána vlnovým vektorem (rozměr m^{-1})
- Rozměr vlnového vektoru je reciproký (převrácený) a celočíselný lineární obal básových lineárních vektorů nazýváme **reciprokým prostorem**

► Laueho difrakční podmínky v reciprokém prostoru

Pro vektory reciprokého prostoru $\vec{b}$ musí platit podmínka ortogonalit s vektory přímého prostoru $\vec{a}$

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

Vektory si můžeme rozepsat do složek:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= (x_1, y_1, z_1) & \vec{b}_1 &= (X_1, Y_1, Z_1) \\ \vec{a}_2 &= (x_2, y_2, z_2) & \vec{b}_2 &= (X_2, Y_2, Z_2) \\ \vec{a}_3 &= (x_3, y_3, z_3) & \vec{b}_3 &= (X_3, Y_3, Z_3)\end{aligned}$$

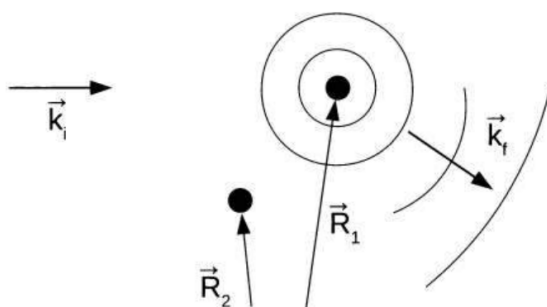
Rozpisem bychom pak dostali 9 rovnic pro 9 neznámých. Odsud postupným vyjádřením složek Z_1, Y_1, X_1 a aplikací definice vektorového součinu:

$$X_1 = 2\pi \frac{y_2 z_3 - y_3 z_2}{a_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad Y_1 = 2\pi \frac{z_2 x_3 - z_3 x_2}{a_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad Z_1 = 2\pi \frac{x_2 y_3 - x_3 y_2}{a_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

Celkem po obdobném odvozování i pro další 2 reciproké vektory:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}\end{aligned}$$

■ STRUKTURNÍ (ROZPTYLOVÝ) FAKTOR⁷



Obrázek 3.46: Rozptyl záření na atomech v polohách $\vec{R}_1$ a $\vec{R}_2$.

Amplituda rozptýlené vlny od n atomů je součtem příspěvků od jednotlivých atomů (rozptylových center).

$$F(\vec{q}) = \sum_n f_n(q) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n}$$

kde f_n je atomový rozptylový faktor od n atomů (závisící na velikosti rozptylového vektoru q)

⁷Daniš, str. 210

Difrakce bude pozorována pouze při splnění difrakční podmínky:

$$\text{rozptylový vektor} \quad \vec{q} = \vec{B}_{hkl} \quad \text{difrakční vektor}$$

Tedy po dosazení dostaneme:

$$F(\vec{B}_{hkl}) \equiv F_{hkl} = \sum_n f_n(q) e^{-i\vec{B}_{hkl} \cdot \vec{R}_n}$$

A pokud vyjádříme souřadnice atomů v tzv. zlomkových souřadnicích (x_n, y_n, z_n) , pak poloha mřížového bodu je popsána vektorem $\vec{R}_n = (x_n a, y_n a, z_n a)$ a platí $\vec{B}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(hkl)$

$$F_{hkl} = \sum_n f_n(hkl) e^{-i2\pi(hx_n + ky_n + lz_n)}$$

■ **SYSTEMATICKÁ VYHASÍNÁNÍ**⁸ Do strukturního faktoru vstupuje nejen typ atomu (skrže f_n), ale také jeho souřadnice.

→ Symetrické rozložení atomů může vést k nulové hodnotě strukturního faktoru pro určité hodnoty indexů hkl (tzv. systematické vyhasínání)

► vyhasínací podmínky = „podmínky kladené na indexy hkl pro vyhasnutí“

► jak zjistit polohu souřadnice vyhasínání?

Do vzorce pro strukturní faktor je třeba dosadit *symetricky neekvivalentní polohy*

$$\text{Například pro BCC mřížku:} \quad \vec{R}_1 = (0, 0, 0)$$

$$2 \text{ mřížové body} \quad \vec{R}_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$\text{Pro 1 druh atomů } (f_n = f): \quad F_{hkl} = f(1 + e^{-i\pi(h+k+l)})$$

$$\Rightarrow F_{hkl} = \begin{cases} 0 & \text{pro } h+k+l = 2n+1 \text{ (liché)} \\ 2f & \text{v ostatních případech} \end{cases}$$

$$\text{Pro FCC mřížku:} \quad \vec{R}_1 = (0, 0, 0)$$

$$4 \text{ mřížové body} \quad \vec{R}_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$$

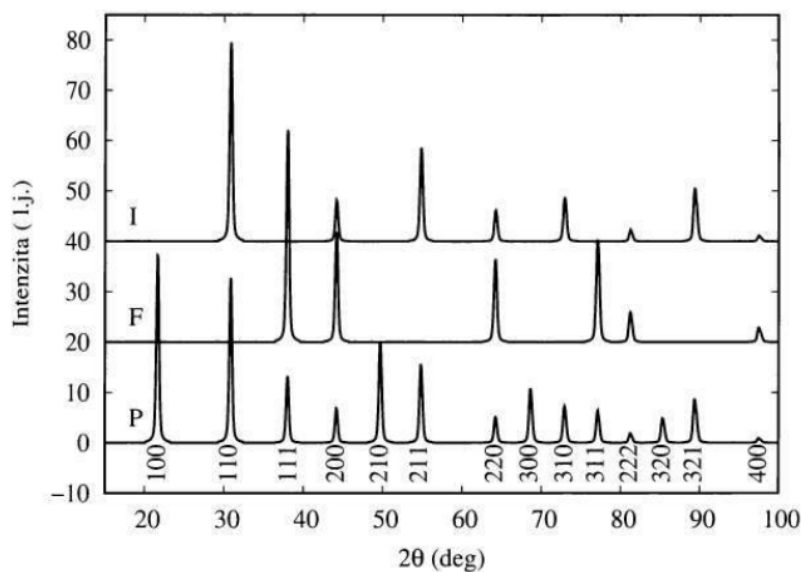
$$\vec{R}_3 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$$

$$\vec{R}_4 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$\text{Pro 1 druh atomů } (f_n = f): \quad F_{hkl} = f(1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)})$$

$$\Rightarrow F_{hkl} = \begin{cases} 0 & \text{pro } h+k+l \text{ smíšená} \\ 4f & \text{pro } h+k+l \text{ čistě sudá NEBO čistě lichá} \end{cases}$$

⁸Daniš, str. 214

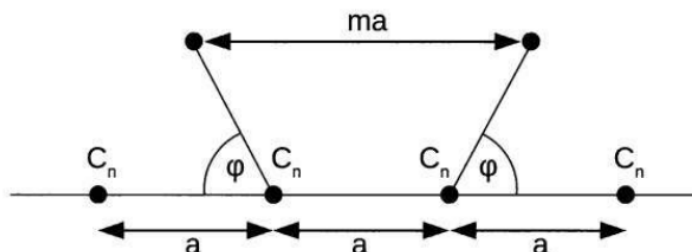


Obrázek 3.49: Simulované rtg. záznamy pro tři typy kubických mříží lišících se centrováním – prostá (P), plošně (F) a prostorově (I) centrovaná. U difrakčních maxim jsou vyznačeny odpovídající indexy hkl .

■ **KVAZIKRYSTAL**⁹ = „pevná látka, jejíž strukturní jednotky jsou uspořádané, nikoliv však periodicky”

► „normální krystaly”

U „normálních periodických” krystalů jsou povoleny pouze jisté vybrané četnosti rotačních os plynoucí ze vztahu pro translační symetrii:



Obrázek 3.2: Přítomnost prvku symetrie translace omezí četnosti možných rotačních os. Pokud je splněna translační symetrie, musí vzdálenost atomů podrobených rotaci o úhel φ (rotační osa C_n) být celočíselným násobkem translační periody a .

$$\cos(\varphi) = \frac{m-1}{2}, \quad \left| \frac{m-1}{2} \right| \leq 1$$

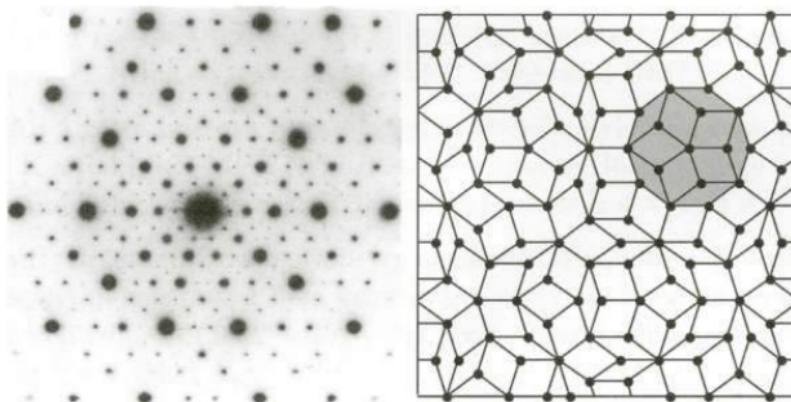
Tabulka 3.1: Povolené četnosti os v základní buňce (s translací)

m	četnost	symbol	φ
-1	2	C_2	180°
0	3	C_3	120°
1	4	C_4	90°
2	6	C_6	60°
3	1	C_1	$0; 360^\circ$

⁹Daniš, str. 229

► **quasikrystaly**

U quasikrystalů jsou povoleny i další osy symetrie, např. desetičetná či pětičetná (vizte obrázek):



Obrázek 3.58: Difrakční záznam kvazikrystalu (vlevo) s desetičetnou symetrií. Rozložení atomů v přímém prostoru je zobrazeno vpravo.

■ **DUALITA VLNA-ČÁSTIC**¹⁰

17.-18. století: spor o podstatu světla, 2 tábory:

- **Částicová hypotéza:** světlo je proud částic
zastánci: Isaac Newton

- **Vlnová hypotéza:** světlo je příčné vlnění
zastánci: Christian Huyghens

Do počátku 19. století rasismus vůči Huyghensovi, přijímán obecně názor, že světlo je proud částic.

- 1803 Youngův experiment prokázal, že světlo interferuje a je tedy vlněním

V 19. století pak rasismus vůči Newtonovi, přijímán obecně názor, že světlo je vlnění.

- Thompson 1897, objeven elektron
- Lenardův experiment (1902) - fotoelektrický jev → světlo se chová i jako proud částic

Sjednocení 2 táborů pod vlnově-částicovou dualitu světla. Světlo se tak dle typu experimentu chová jako vlnění (interference, difrakce) nebo korpuskulárně (fotoefekt, Comptonův rozptyl)

■ **FOTOEFEKT**¹¹

Lenard zjistil, že po osvětlení kovů viditelným světlem nebo UV zářením dochází k uvolnění částic (elektronů), které jsou vlastnostmi identické s částicemi katodového záření.

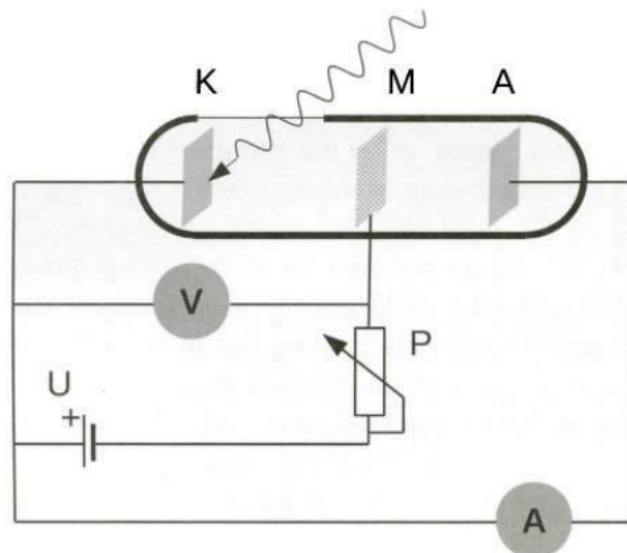
Světlo je schopno uvolnit elektrony z kovu. Pro světlo - vlnění se předpokládala platnost následujících jevů:

- | | |
|--|---|
| 1. Vyšší intenzita světla = vyšší kinetická energie uvolněných elektronů | † |
| 2. Nižší intenzita světla = delší čas potřebný k uvolnění elektronů | † |
| 3. Světlo jakékoliv délky bude schopno uvolnit elektrony z kovu | † |

Experiment však prokázal, že tyto předpoklady **NEPLATÍ!**

¹⁰Daniš, str. 235

¹¹Daniš, str. 235



Obrázek 4.1: Schéma zapojení použité Lenardem v [53].

Místo toho **PLATÍ** následující:

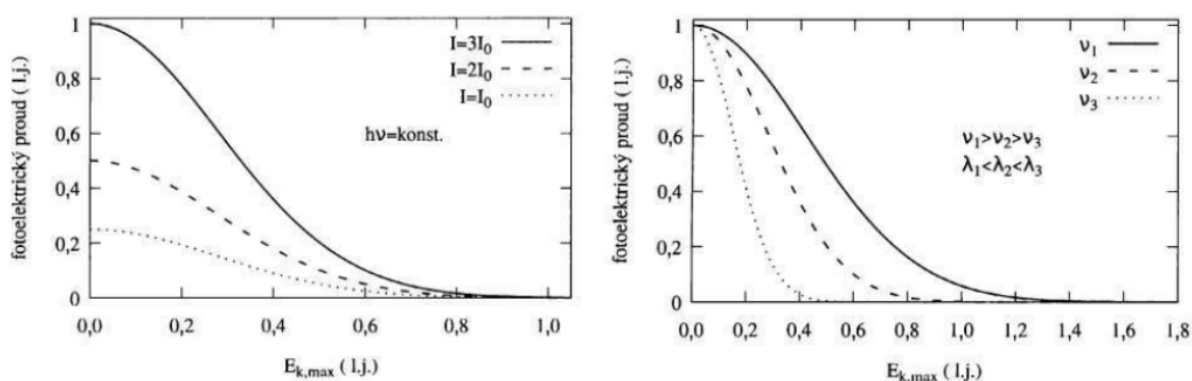
1. Energie uvolněných elektronů **NEZÁVISLÁ** na intenzitě světla (liší se pouze jejich počet - elektrický proud) ✓
2. Elektrony jsou uvolněny okamžitě po dopadu světla ✓
3. Elektrony se uvolňují až od určité prahové frekvence - energie dopadajícího světla ✓

► Fotoefekt vysvětlil Albert Einstein, 1905

Maximální energie fotoelektronů $E_{e,\max}$ závisí na energii dopadajícího záření vztahem:

$$h\nu = E_{e,\max} + W$$

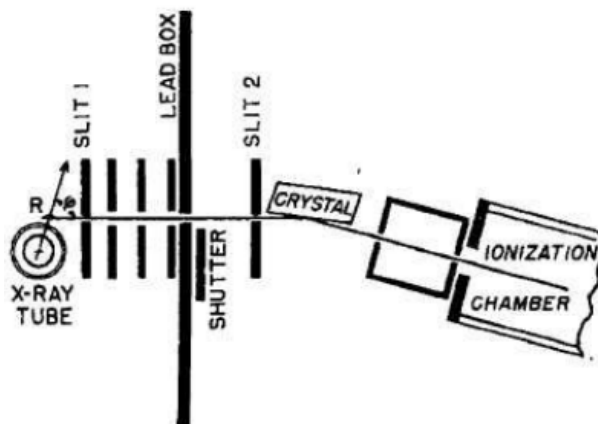
kde W je tzv. výstupní práce a závisí na materiálu katody.



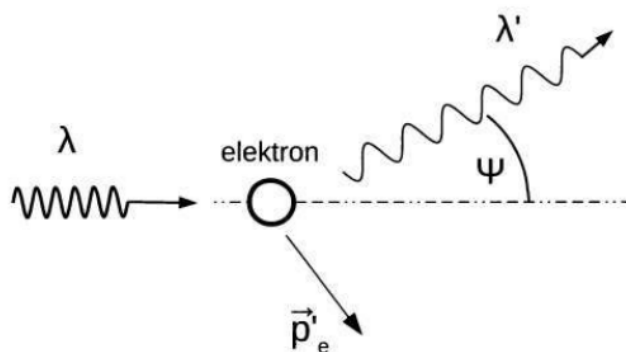
Obrázek 4.3: Závislost fototelektrického proudu na brzdém potenciálu U pro různé intenzity dopadajícího monochromatického světla (nahore). Dole závislost fototelektrického proudu na brzdém potenciálu U pro různé vlnové délky, frekvence, záření.

- **COMPTONŮV ROZPTYL** = „neelastický rozptyl fotonů na nabitě částici (nejčastěji elektronu)” Compton studoval rozptyl rtg. záření na různých prvcích. **Nezávisle** na atomovém čísle prvku, na kterém dochází k rozptylu, má část rozptýleného záření **menší** energii.¹²

Změna energie (vlnové délky) záření závisí pouze **na úhlu rozptylu**.



- rozptyl fotonu na volném elektronu (nejjednodušší příklad)
Volný elektron = je v klidu, nebo se pohybuje rovnoměrně přímočaře.



Obrázek 4.5: Schéma Comptonova rozptylu – neelastického rozptylu fotonu na *volném* elektronu. Foton je rozptýlen pod úhlem Ψ , část hybnosti odnáší i elektron.

Foton má před srážkou energii a hybnost: $E = cp$, $\vec{p} = (p, 0, 0)$

Foton má po srážce energii a hybnost: $E' = cp'$, $\vec{p}' \neq (p, 0, 0)$

Elektron má před srážkou energii a hybnost: $E_e = m_e c^2$, $\vec{p}_e = (0, 0, 0)$

Elektron má po srážce energii a hybnost: $E'_e = c\sqrt{p_e'^2 + m_e^2 c^2}$, $\vec{p}_e' \neq (0, 0, 0)$

Při rozptylu platí zákony zachování energie a hybnosti (v relativistickém tvaru):

$$\begin{aligned} E + E_e &= E' + E'_e, & \vec{p} &= \vec{p}' + \vec{p}'_e \\ \Rightarrow E'_e &= E + E_e - E', & \vec{p}'_e &= \vec{p} - \vec{p}' \end{aligned}$$

Obě rovnice upravíme, přenásobíme c^2 a odečteme od sebe, abychom se zbavili neznámé energie elektronu E'_e

$$m_e^2 c^4 = m_e^2 c^4 + 2(E E_e - E E' - E_e E' + c^2 \vec{p} \vec{p}')$$

¹²Daniš, str. 239

Označíme-li ψ úhel mezi vektory $\vec{p}$ a $\vec{p}'$, můžeme upravit na:

$$EE_e = EE' + E_e E' - c^2 pp' \cos \psi$$

Po dosazení za E_e, E a E' získáme výraz pro energii fotonu po srážce

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \psi)}$$

Rozdíl energií fotonů před a po srážce je tedy

$$E - E' = \frac{EE'}{m_e c^2} (1 - \cos \psi)$$

Za energie fotonu dosadíme $E = hc/\lambda$ a $E' = hc/\lambda'$, a vyjádříme rozdíl vlnových délek fotonu před a po srážce

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \psi)$$

kde člen $h/m_e c$ se označuje jako Comptonova vlnová délka λ_C

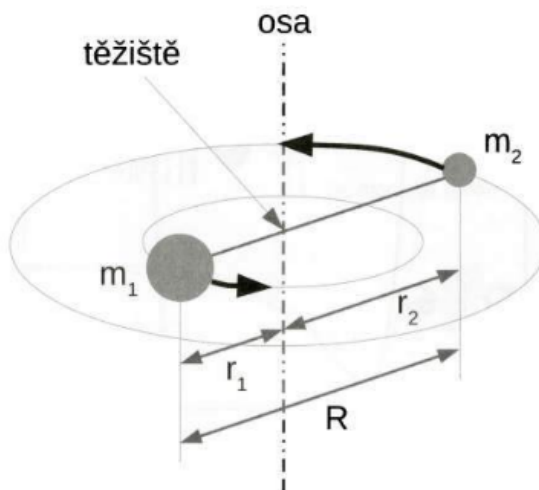
■ VIBRACE A ROTACE MOLEKUL

► dynamika atomů (jader) v molekulách:

1. globální pohyb molekuly (jako tuhého celku) = translace, **rotace**
2. vnitřní pohyby molekuly (kolem rovnovážných poloh) = malé kmity alias **vibrace**

► rotace

Nejjednodušší model: tuhý rotátor (činka), délka vazby se nemění, vizte obr. 2.17



Obrázek 2.17: Rotace dvouatomové molekuly kolem těžiště.

Úhlovou frekvenci rotace označíme ω . Máme těžišťovou soustavu. Moment setrvačnosti molekuly je dán klasickým vztahem

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$$

a zároveň platí zákon zachování hybnosti:

$$m_1 r_1 = m_2 r_2$$

U molekul většinou známe délku vazby R , ale neznáme polohy od těžiště r_1 ani r_2 , proto si vyjádříme pomocí rovnice $R = r_1 + r_2$ naše neznámé:

$$r_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} R \quad r_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} R$$

Po dosazení za r_1 a r_2 dostaneme:

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} R^2 = m' R^2$$

kde $m' = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ je tzv. redukovaná hmotnost

Pomocí momentu setrvačnosti I můžeme vyjádřit moment hybnosti L

$$L = I\omega$$

Ten ale musí splňovat kvantovací podmínku (J bude kvantovat rotační hladiny molekuly)

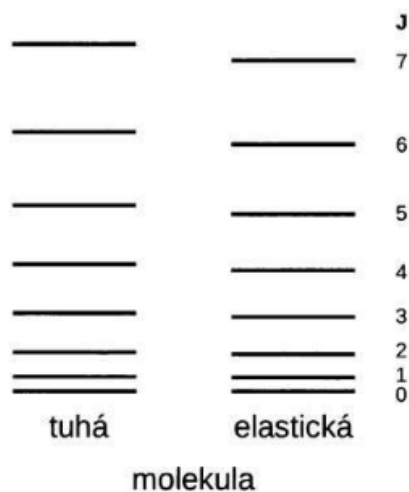
$$|\vec{L}| = L = \hbar \sqrt{J(J+1)} \quad J = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Rotační energie molekuly jsou pak definovány vztahem:

$$E_J = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}$$

Můžeme pozorovat absorpci energie (záření), pokud se bude jeho energie rovnat rozdílu energií dvou (rotačních) energetických hladin ΔE

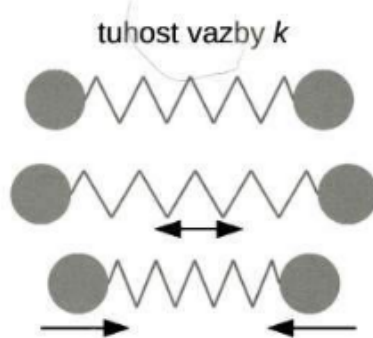
Reálné molekuly ale mají elastické meziatomární vazby, což se též promítá do rozdílů energetických rotačních hladin.



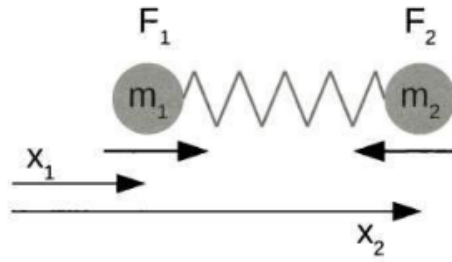
Obrázek 2.19: Schématické znázornění změn ve vzájemné vzdálenosti energetických hladin rotující molekuly.

► vibrace

Názorně si lze vibrace představit jako deformaci elastické pružinky mezi dvěma tuhými koulemi



Obrázek 2.18: Pružnost vazby mezi atomy v molekule.



Obrázek 2.24: Vibrace dvouatomové molekuly, tvořené atomy s polohovými vektory $\vec{x}_1$ a $\vec{x}_2$. Vazba mezi atomy je zakreslena jako pružina o tuhosti k . Dojde-li k výchylce atomů z rovnovážných poloh, začnou působit návratové síly $\vec{F}_1$ a $\vec{F}_2$.

Mechanika: frekvence kmitů závaží o hmotnosti m zavěšené na pružině o tuhosti k

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Jakou frekvenci budou kmitat dvě závaží atomů připevněná na konce pružiny (vazby)? Označme hmotnosti atomů $m_{1,2}$, jejich souřadnice $x_{1,2}$ a jejich rovnovážnou polohu $\mathcal{L}$. Změna délky pružiny x je pak dána rovnicí:

$$x = x_2 - x_1 - \mathcal{L}$$

Síly F_1 a F_2 , natahující a smršťující pružinu, působí proti sobě, jejich součet je roven nule (u vibrací nedochází k translačnímu pohybu molekuly jako celku),

$$F_1 = m_1 \ddot{x}_1 = kx$$

$$F_2 = m_2 \ddot{x}_2 = -kx$$

Opět neznáme okamžité souřadnice atomů x_1 a x_2 . Jediná měřitelná veličina je okamžitá délka vazby (vzdálenost mezi atomy) x , jejíž druhá derivace má tvar:

$$\ddot{x} = \ddot{x}_2 - \ddot{x}_1$$

Vynásobíme-li rovnici pro F_1 hmotností m_2 a rovnici pro F_2 hmotností m_1 , dostaneme:

$$\begin{array}{r} - \quad (m_2 F_1 = m_2 m_1 \ddot{x}_1 = m_2 kx) \\ \quad m_1 F_2 = m_1 m_2 \ddot{x}_2 = -m_1 kx \\ \hline m_1 m_2 (\ddot{x}_2 - \ddot{x}_1) = -k(m_1 + m_2)x \end{array}$$

$$\Rightarrow \boxed{m' \ddot{x} = -kx}, \quad \text{kde } m' = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \text{ je redukovaná hmotnost dvouatomové molekuly}$$

Frekvence vibrací molekuly se tudíž dá popsat podobně jako pro závaží na pružině, místo m dosadíme m'

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m'}} \quad \Rightarrow \quad \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m'}}$$

Klíčová myšlenka:

Ve světě atomů jsou i vibrace kvantované, nejjednodušší popis je pomocí **harmonického oscilátoru**

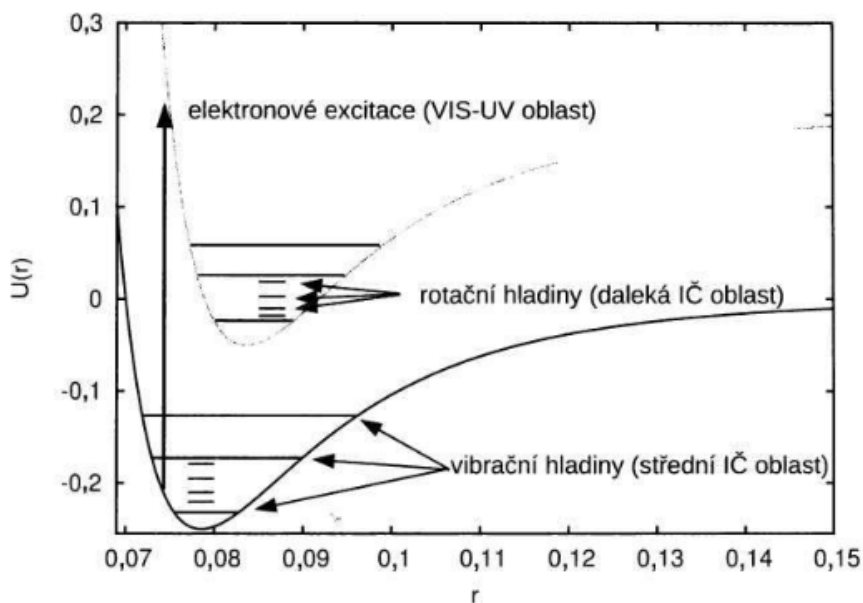
Energetické hladiny harmonického oscilátoru:

$$E(n) = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu_0, \quad \text{kde } \nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m'}}$$

Kde n je číslo, kvantující jednotlivé hladiny.

► rotačně-vibrační hladiny

Ve skutečnosti se s na sobě nezávislými rotačními a vibračními spektry nesetkáme. Pozorujeme však přechody v rotačně vibračních hladinách:



Obrázek 2.25: Rotačně vibrační energetické hladiny v molekule. Mezi vibračními hladinami jsou vnořeny hladiny rotační. Přechody mezi elektronovými hladinami jsou pozorovány ve viditelném/UV oboru elektromagnetického spektra. Jejich povaha je shodná se spektry atomů.

NEJVÍCE ENERGIE: elektronová excitace

STŘEDNĚ ENERGIE: vibrace

NEJMÉNĚ ENERGIE: rotace

► rotačně-vibrační spektra molekul:

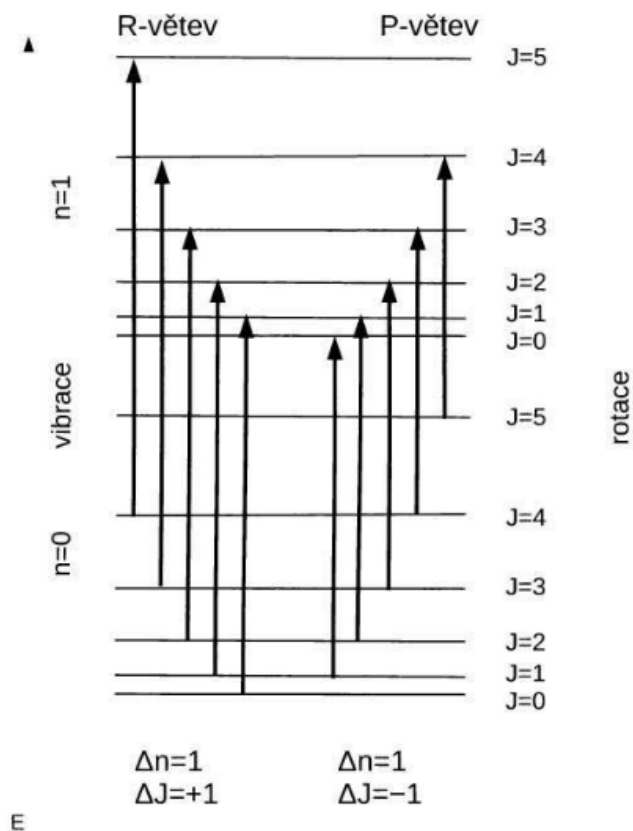
Výběrová pravidla pro pozorované vibračně-rotační hladiny dvouatomové molekuly:

$$\Delta n = 1 \quad \text{pro vibrační hladiny}$$

$$\Delta J = \pm 1 \quad \text{pro rotační hladiny}$$

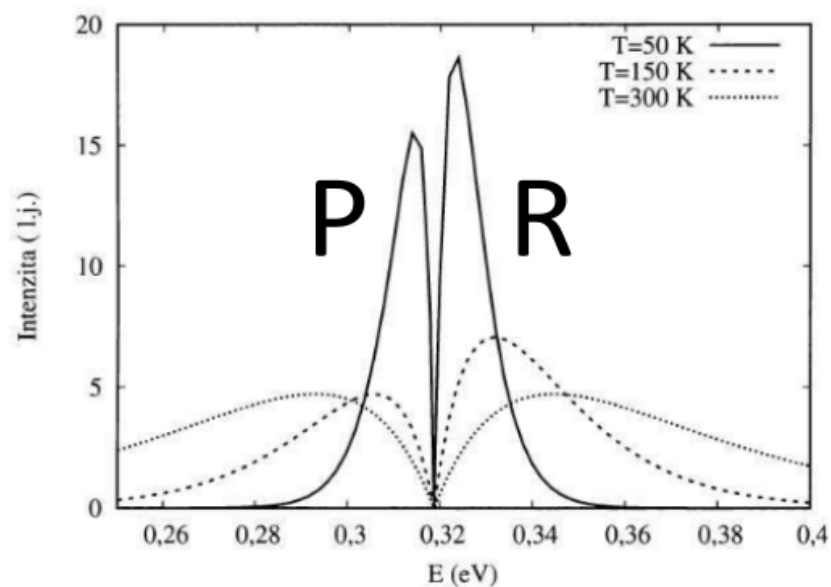
kde n a J jsou kvantová čísla vibračních a rotačních hladin

Pak rozlišujeme 2 větve: R ($\Delta n = 1, \Delta J = +1$) a P ($\Delta n = 1, \Delta J = -1$)



Obrázek 2.26: Dvě větve spektra rotačně-vibračních hladin.

Pro nižší teploty převažuje R větev, protože jsou s vyšší pravděpodobností obsazeny základní stavy J , takže molekula již nemůže snížit svou rotaci (záporné hodnoty J jsou zakázány)



Obrázek 2.28: Schematické rozložení intenzit spektrálních linií P a R větví v závislosti na teplotě.

■ **FONON** = „quantum energie vibrací atomů v krystalické mříži“¹³

Fonon, též kmitový mód, vychází z představy, že energie kmitů krystalické mříže lze kvantovat.

Pokud atom přijme dostatek energie, např. formou tepla, začne kmitat na frekvenci ω . Energie kmitového módu je pak $E = \hbar\omega$.

Fonon považujeme za „quasičástici“, tj. objekt, který mimo krystal neexistuje, slouží jen k popisu daného jevu.

Fonon se kvantuje jako lineární harmonický oscilátor:

Tabulka 5.1: Srovnání kvantování LHO a fononů.

	oscilátor	fonony
základní stav	$\frac{1}{2}\hbar\omega_0$	nejsou fonony
excitovaný stav	$\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$	$n_{b\vec{k}}$

■ **DISPERZNÍ RELACE** = „závislost frekvence vlnění na směru šíření (vlnovém vektoru k)“¹⁴

► disperse (známe z optiky)

Příklad disperse (duha):



► de Broghlieho hypotéza = „duální chování hmotných částic“

$$\text{Energie fotonu: } E = mc^2 = h\nu \quad \rightarrow \quad \text{Pro hmotné částice: } mv^2 = h\nu = h\frac{v}{\lambda}$$

$$\text{de Broghlieův vztah: } \lambda = \frac{h}{mv}$$

Elektrony vykazují dle de Broghlieova vztahu vlnové vlastnosti, odpovídající vlnové délce, kterážto je nepřímo úměrná jeho hybnosti.

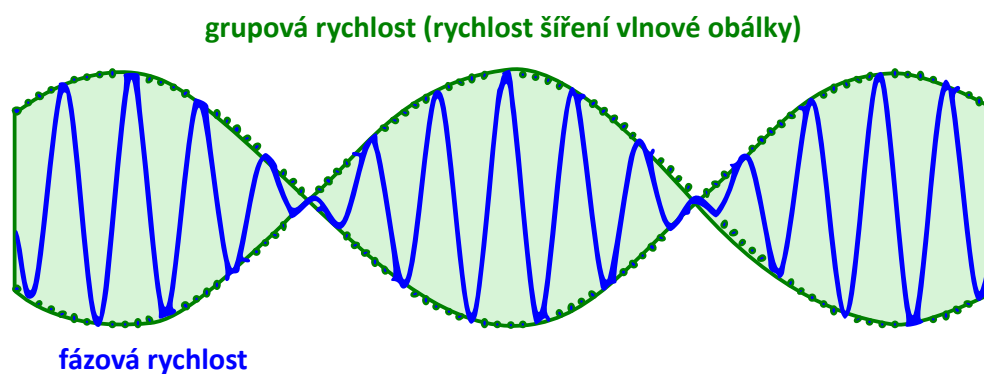
¹³Daniš, str. 310

¹⁴Daniš, str. 244

Z dispersní relace můžeme pak určit fázovou a grupovou rychlost šíření vlnění.

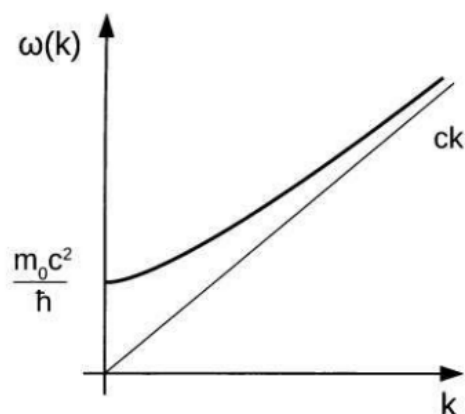
Grupová rychlost popisuje rychlost pohybu vlnového balíku.

Fázová rychlost popisuje rychlost pohybu fáze vlnění prostorem.



- Dispersní relace pro foton ve vakuu: $\omega(k) = ck$
 $\rightarrow$ **pro foton:** fázová u_f = grupová rychlost u_g
- Dispersní relace pro hmotnou částici:

$$\omega(k) = c\sqrt{\frac{m_0c^2}{\hbar} + k^2}$$



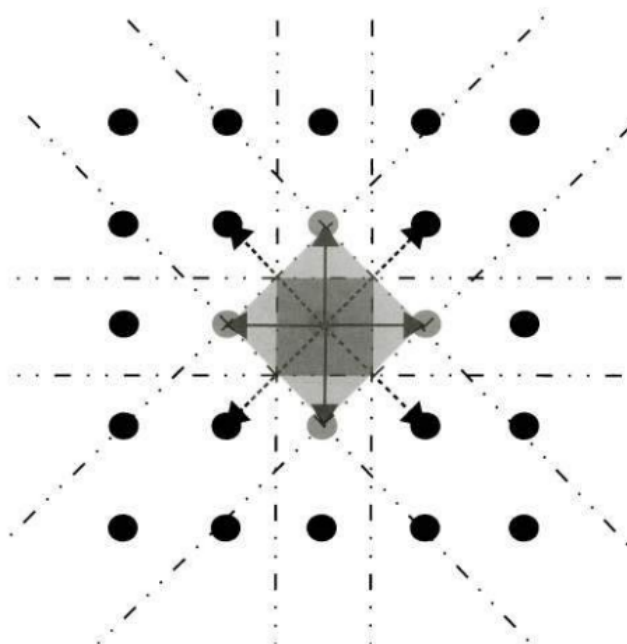
Obrázek 4.7: Dispersní relace hmotné částice (silnější linie) ve srovnání s dispersní relací pro foton ve vakuu.

■ **BRILLOUINOVA ZÓNA** = „specificky definovaná elementární buňka v recipročním prostoru”¹⁵

Konstrukce Brillouinovy zóny:

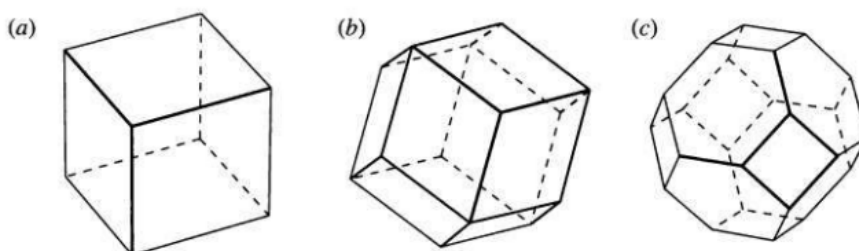
1BZ první Brillouinovu zónu získáme zvolením reciprokého mřížového bodu a z něj vyvedeme spojnice k nejbližším dalším bodům. Propojíme středy stran spojnic pomocí přímek (2D) nebo rovin (3D)

1BZ druhou Brillouinovu zónu získáme obdobným postupem pro spojnice k druhým nejbližším sousedům



Obrázek 5.3: Konstrukce první (tmavě šedá) a druhé (světle šedá) Brillouinovy zóny.

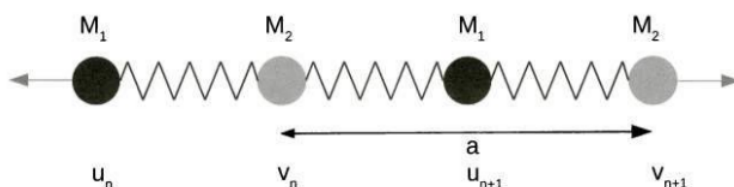
V přímém prostoru lze vytvořit obdobně elementární opakující se motiv, ten se ale nazývá **Wigner-Seitzova buňka**



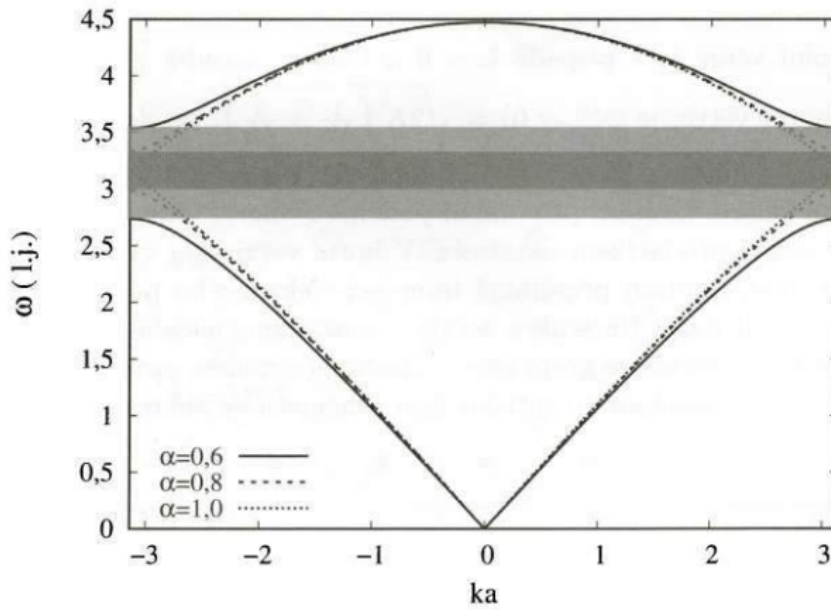
Obrázek 5.4: Vzhled prvních Brillouinových zón pro kubické mříže, (a) primitivní, (b) bcc a (c) fcc.

► dispersní relace dvouatomárního řetízku

Pokud si vezmeme dvouatomární řetízek s různě hmotnými atomy $M_1 \neq M_2$, dostaneme na hranici **1BZ** oblast zakázaných frekvencí.

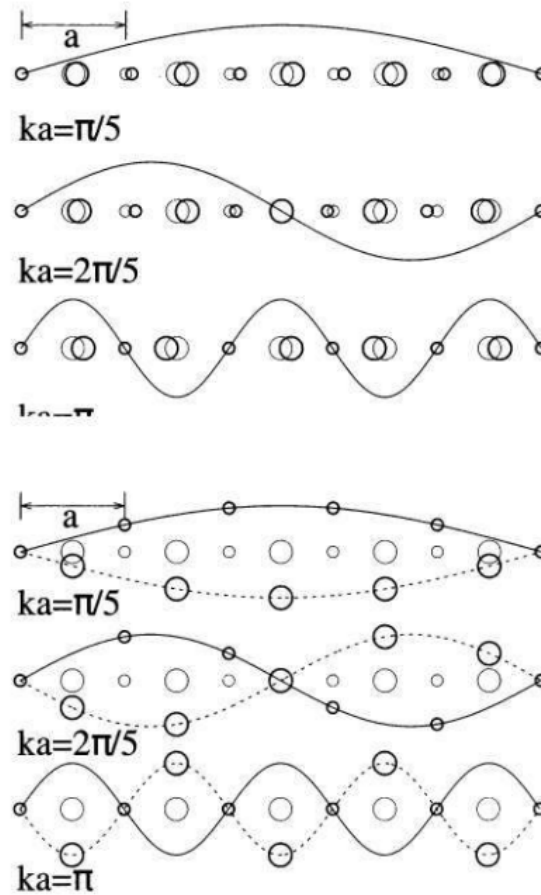


¹⁵Daniš, str. 183



Obrázek 5.7: Disperzní relace dvouatomového řetízku. Pro různé hmotnosti atomů $M_1 \neq M_2$ se na hranici 1BZ objeví oblast *zakázaných* frekvencí (vyznačeny šedě).

► optická a akustická větev

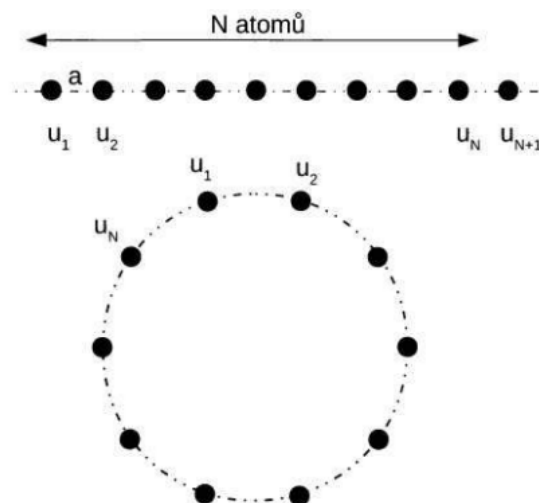


Obrázek 5.8: Výchylky atomů ve dvouatomárním řetízku pro několik hodnot součinu ka . Nahoře jsou podélné akustické kmity, dole optické. Symboly vyznačené tenkou linií odpovídají rovnovážným polohám atomů vzdálených od sebe s periodou a .

■ PERIODICKÉ OKRAJOVÉ PODMÍNKY¹⁶

- okrajové podmínky - uplatňují se u krajních atomů řetízku s konečnou délkou
- periodické okrajové podmínky - uplatňují se u řetízků stočených do kružnice

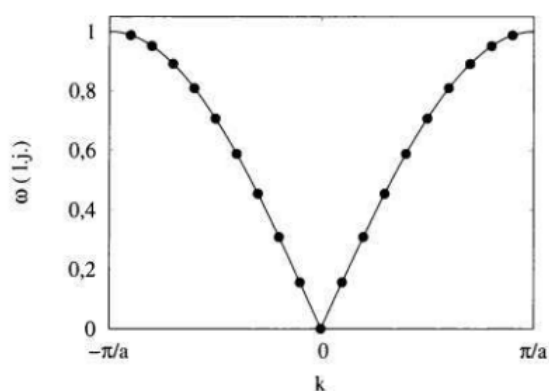
Born-Kármánovy podmínky $u_n = u_{n+N}$



Obrázek 5.10: Konečný řetízek složený z N atomů. Řetízek stočený do kružnice odpovídá periodickým okrajovým podmínkám.

V **1BZ** máme povoleno jen N diskrétních hodnot vlnového vektoru. Neboť $k = Z \frac{2\pi}{aN}$ kde Z je celé číslo a $k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$.

Nyní můžeme porovnat nekonečný řetízek s řetízem s periodickými okrajovými podmínkami:



Obrázek 5.11: Porovnání disperzní relace nekonečného monoatomárního řetízku (spojitá linie) a konečného, s periodickými okrajovými podmínkami (body).

Na jednu hodnotu k (vibrační stav) připadá v recipročním prostoru:

$$\Delta k = \frac{dk}{dN} = \frac{2\pi}{aN} = \frac{2\pi}{L}, \quad \text{kde délka řetízku } L = aN, \quad \text{a délka 1BZ} = \frac{2\pi}{a}$$

¹⁶Daniš, str. 296

■ *HUSTOTA STAVŮ* = „větší hustota bodů na dispersní relaci se vyskytuje směrem k okrajům BZ”¹⁷

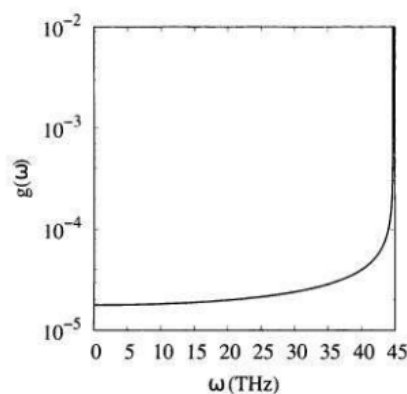
Hustota stavů (DOS) udává počet vibračních módů najednotku frekvence a na jednotku délky (řetízek) NEBO objemu (krystal).

Definice pro monoatomární řetízek:

$$g(\omega) = \frac{1}{L} \frac{dN}{d\omega}$$

Po dosazení:

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \left(\sqrt{\frac{Ka^2}{M}} \cos\left(\frac{k(\omega)a}{2}\right) \right)^{-1}$$



Obrázek 5.12: Hustota (vibračních) stavů pro monoatomární řetízek. Na hranici BZ $\omega(k = \frac{\pi}{a})$ má $g(\omega)$ singularitu.

■ *TERM* = „konfigurace základního stavu atomu ve spektroskopické notaci”¹⁸

Obecný tvar termu:

$$\boxed{2S+1 X_J}$$

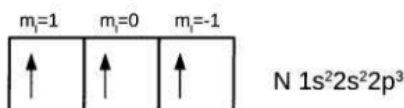
kde S a J jsou hodnoty spinového a celkového momentu hybnosti valenční slupky.
kde X označuje hodnotu orbitálního momentu hybnosti L „orbitalovou notací”

$$L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 \dots$$

↓

$$X = S, P, D, F, G, H, I \dots$$

Například pro atom dusíku se třemi $2p$ elektrony bude základnímu stavu odpovídat konfigurace:



$$S = 3 \cdot \left(+\frac{1}{2}\right) \quad L = 1 + 0 + (-1) = 0 \quad J = |L - S| = (L + S) = \frac{3}{2}$$

Term pro dusík: $^4S_{\frac{3}{2}}$

¹⁷Daniš, str. 295

¹⁸Daniš, str. 82

■ SPEKTRUM ATOMU¹⁹

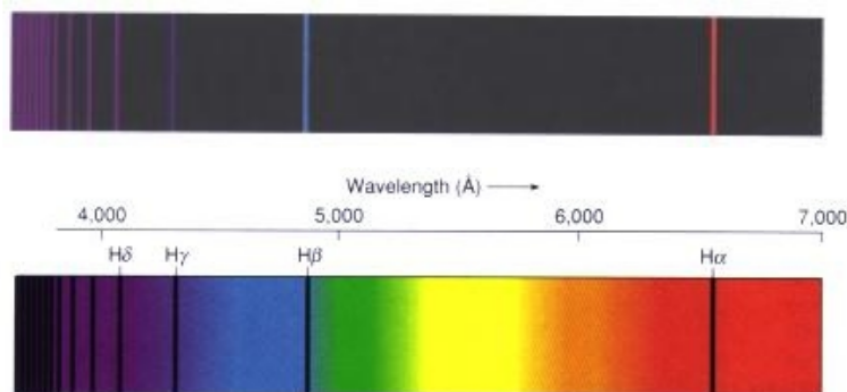
Polovina 19. století: Kirchhoff+Bunsen = velká láska a objev atomových spekter
1802: Wollaston, pozorování slunečního spektra, čáry podivně odděleny **černými** liniemi

Platí: spektrum každého prvku je jednoznačné a lze jej použít k jeho identifikaci
zhruba 1/4 prvků periodické tabulky byla nalezena díky spektroskopii

Existují 2 typy spekter:

1. emisní - atom vyzařuje záření o specifické frekvenci
2. absorpční - atom pohlcuje záření o specifické frekvenci

spektrum vodíku



K spektrálním projevům dochází při kvantovém skoku elektronu na vyšší hladinu (excitace) při pohlcení přesného kvanta energie $E = h\nu$ fotonu nutného pro energetický přeskok NEBO při skoku elektronu na nižší hladinu (deexcitace) za vyzáření kvanta energie fotonu odpovídajícímu energetickému rozdílu daných hladin.

Pozorujeme jen takové přeskoky, které jsou povoleny. Povolené přeskoky vyplývají z rozdílů energetických hladin a jsou rozdílné pro různé prvky. Energetické hladiny v atomovém orbitalu jsou diskrétní (kvantované).

■ SPIN = „prostorové kvantování momentu hybnosti elektronu“²⁰

Spin byl objeven při Stern-Gerlachově experimentu 1921-22.



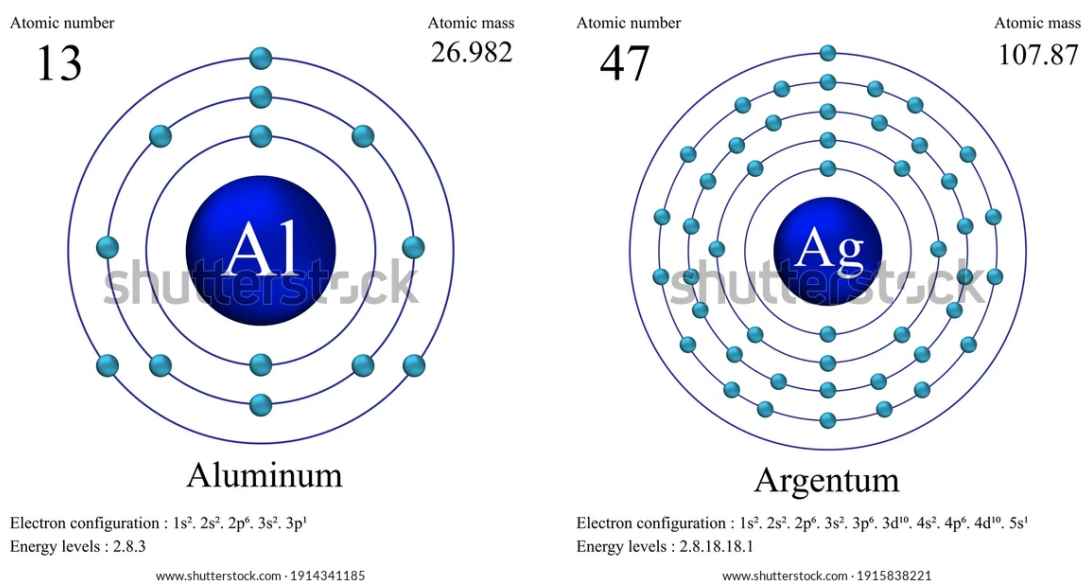
Obrázek 1.31: Schéma experimentálního uspořádání Sternova–Gerlachova experimentu.

¹⁹Daniš, str. 16

²⁰Daniš, str. 74

V experimentu bylo použito stříbro vyhřáté na 1000 °C. Svazek neutrálních atomů stříbra vylétává z píčky a jelikož jsou neutrální, nepůsobí na ně Lorenzova síla.

Stříbro má ve své valenční vrstvě pouze jeden (nespárovaný) elektron. Tento elektron může mít spin orientovaný nahoru UP nebo dolů DOWN.



A naopak, elektrony, které se liší pouze svým spinovým kvantovým číslem „(jsou v jednom boxíku)” se nazývají *párové elektrony*. Hliník má ve své valenční slupce jeden spárovaný pár elektronů a jeden nespárovaný elektron.

Prvky, které se skládají pouze ze spárovaných elektronů, nenechají se odklonit v rámci S-G experimentu, protože spinová orientace jejich spárovaných elektronů se navzájem vyruší.

V případě prvků s nespárovanými elektrony se tyto elektrony orientují buď směrem k jižnímu NEBO směrem k severnímu pólu. A v takovém případě rozptýlí se v magnetickém poli buď nahoru, nebo dolů od původního směru svazku.

Stříbro je ideálním kandidátem pro tento experiment, protože (na rozdíl od paramagnetického hliníku) je diamagnetické (dia=skrz) a tudíž do experimentu nepřispívá žádnými svými magnetickými vlastnostmi.

Spin splňuje stejné kvantovací podmínky, jako orbitální moment:

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1), \quad s = \frac{1}{2} S_z = \hbar m_s = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Velikost spinu je narozdíl od orbitálního momentu hybnosti konstantní (kvantové číslo s má pouze jednu hodnotu)

Dva typy částic dle spinu:

1. **poločíslný spin = fermiony**, ctí Pauliho vylučovací princip
2. **celočíslný spin = bosony**, kašlou na Pauliho vylučovací princip

Elektron v atomu má celkem 3 momenty hybnosti:

1. orbitální moment hybnosti $\vec{L}$
2. spinový moment hybnosti $\vec{S}$
3. celkový moment hybnosti $\vec{J}$

■ VÝBĚROVÁ PRAVIDLA = „pravidla pro přeskoky mezi energetickými hladinami” ²¹

$$\frac{1}{\lambda} \sim E_{nlm} - E_{n'l'm'}$$

kde nlm a $n'l'm'$ jsou kvantová čísla popisující jednotlivé energetické hladiny

Pro „jednoelektronové atomy” se v dipólovém přiblížení realizují jen přeskoky povolené následujícími **výběrovými pravidly**:²²

$$\begin{aligned} \Delta n &= n - n' && \text{libovolné} \\ \Delta l &= l - l' && \Delta l = \pm 1 \\ \Delta m &= m - m' && \Delta m = 0, \pm 1 \end{aligned}$$

U ostatních atomů existují také výběrová pravidla, ale jsou složitější a vystupují v nich další kvantová čísla sloužící k detailnějšímu popisu jednotlivých energetických stavů atomu.

Výše uvedená výběrová pravidla se pro spektrální linie projeví v matici přechodu M_{ij} mezi stavy i a j .

Pozor! Pravidla (pro spektrální linie) nemusí platit vždy! Jsou počítána pro určité podmínky (tlak, teplota, ...), a tak můžeme ve zředěných plynech pozorovat spektrální linie, které jsou za běžných podmínek zakázané.

Přechody probíhající podle jiných pravidel (složitější modely, další přiblížení, ...) se nazývají zakázané přechody. Zakázané přechody jsou také ve většině případů méně pravděpodobné.

Intenzity spektrálních čar jsou přímo úměrné pravděpodobnosti přechodu.

Obecněji:

$$\bar{u} = \int u \Psi_{nlm} \Psi_{n'l'm'}^* dV \neq 0 \quad \text{povolené přechody}$$

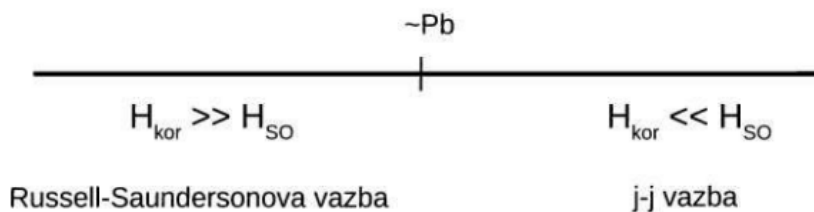


²¹Daniš, str. 60, 125

²²<http://fyzika.jreichl.com/main.article/view/777-vyberova-pravidla>

■ $L - S$ A $j - j$ VAZBA²³

- ▶ $L - S$ vazba = „spin-orbitální vazba“, značí se H_{SO}
Vzájemné působení spinu a orbitálního momentu hybnosti L
- ▶ $j - j$ vazba = „metoda silné vazby“
Pro těžší prvky $Z > 30$ převažuje nad Russell-Saundersovou vazbou



Obrázek 1.38: U lehčích atomů je silnější elektron–elektronová interakce (coulombické působení), u těžších atomů převládá působení mezi momenty hybnosti $\vec{S}$ a $\vec{L}$.

■ KVANTOVACÍ PODMÍNKY²⁴

Po objevení subatomárních částic (protonu a elektronu) vyvstala otázka jak jsou atomy uspořádány.

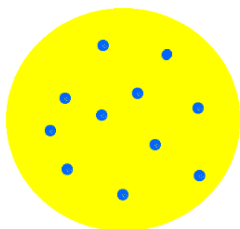
První model: Thompsonův pudinkový model, vyvrácen Rutherfordovými experimenty.

Druhý model: Rutherfordův planetární model, vyvrácen Maxwellovými rovnicemi.

2 základní modely (klasické)

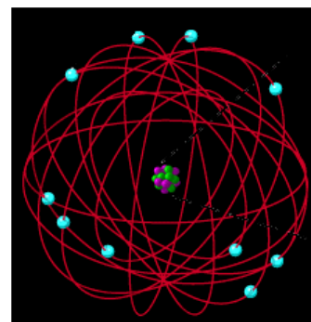
(J.J.) Thomsonův "Plum Puding" model

- homogenně rozložená kladná hmota
- v ní záporné elektrony
- možná valence
- oscilátory - výklad čarových spekter



planetární Rutherfordův model

- kladné malé jádro, kolem záp. elektrony
- kvantitativně vysvětloval Rutherfordovy pokusy



11

Rutherfordův planetární model

nedostatky modelu:

- elektrodynamicky nestabilní



→ spojité záření vs. experiment (čarová spektra)

²³Daniš, str. 83, 85

²⁴Daniš, str. 49

- Bohrov model atomu = první pokus o „kvantování atomu“

Niels bohr postuloval následující 4 podmínky:

1. elektron krouží kolem jádra po kruhových drahách
2. přípustné jsou jen vybrané stacionární orbity (na nich elektron obíhá a nezáří)
3. stacionární orbity jsou dány kvantováním momentu hybnosti

$$L = n\hbar$$

kde $\hbar$ je redukovaná Planckova konstanta

4. elektrony mohou přeskokovat mezi jednotlivými orbity - přeskoky jsou spojeny s vyzařením nebo s pohlcením fotonu

$$\hbar\omega = E_n - E_m$$

kde E_n a E_m jsou energie elektronu na orbitách s indexy n a m

Pozn.: Kvantování orbitálního momentu hybnosti vede i na kvantování energie elektronů v atomu.

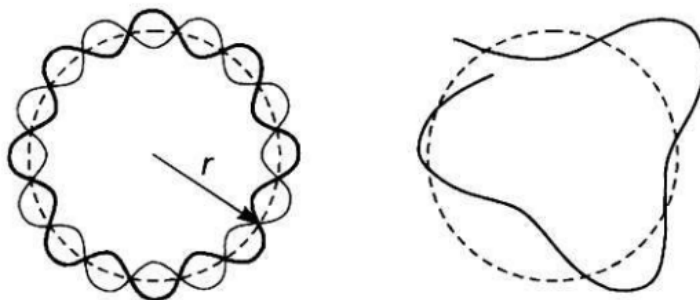
Rozdíl mezi orbitou a orbitalem:

- orbita = myšlená kruhová oběžná dráha elektronu kolem jádra atomu

Značíme $n=1,2,3,4,\dots$ nebo K,L,M,N,... orbity

- orbital = funkce popisující prostorovou pravděpodobnost nalezení elektronu na dané slupce

Značíme S,P,D,F, (G, H, I, ...)



Obrázek 1.21: V Bohrově modelu atomu vodíku jsou povoleny jen takové orbity, jejichž délka odpovídá celočíselnému násobku de Broglieovy vlnové délky elektronu.

$$2\pi r_n = n\lambda = n \frac{h}{mv} \Rightarrow pr = n\hbar$$

kde $pr = |\vec{r} \times \vec{p}| = |\vec{L}| = L$ alias pr je rovna velikosti momentu hybnosti elektronu

Energie elektronu na dráze n je dána součtem kinetické a potenciální energie,

$$E_n = \frac{1}{2}m_e v_n^2 - \frac{e'^2}{r_n} = -\frac{e'^2}{2r_n} = -\frac{e'^4 m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -Ry \frac{1}{n^2},$$

kde jsme použili $v_n = \frac{p_n}{m_e} = \frac{n\hbar}{m_e r_n}$. Konstanta $Ry = \frac{e'^4 m_e}{2\hbar^2} = 13,6\text{eV}$ se nazývá Rydbergova.

Pozn.: Správně bychom měli použít ve vztahu redukovanou hmotnost $m^* = \frac{M_J m_e}{M_J + m_e}$ kde M_J je hmotnost jádra, protože elektron obíhá okolo těžiště atomu, nikoliv okolo jádra samotného.

Což můžeme využít pro přepis 4. Bohrovy kvantovací podmínky

$$\hbar\omega = E_n - E_m = Ry \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

■ **CHEMICKÁ VAZBA** = „energeticky stabilisující silová interakce poutající navzájem sloučené atomy do podoby molekuly“²⁵

► chemická vazba z pohledu stability

stabilní vazba: energie molekuly < energie jednotlivých atomů

Energetická bilance lze zapsat pomocí rovnice:

$$E_s = E(R_\alpha) - \sum_{\alpha} E_{\alpha}^{\text{atom}}$$

kde α indexuje jednotlivé atomy a R_α udává polohu atomu α

O stabilitě molekuly rozhoduje znaménko E_s

$$\begin{array}{ll} E_s < 0 & \text{molekula je stabilní} \\ E_s > 0 & \text{molekula je nestabilní} \end{array}$$

► typy chemické vazby

1. žádná vazba: vazba mezi atomy nevznikne, je energeticky nevýhodná
2. vazba iontová
3. vazba kovalentní
4. vazba van der Waalsova
5. kovová vazba (vodivostní elektrony)
6. vazba BDSM (pozor, je vzrušující)

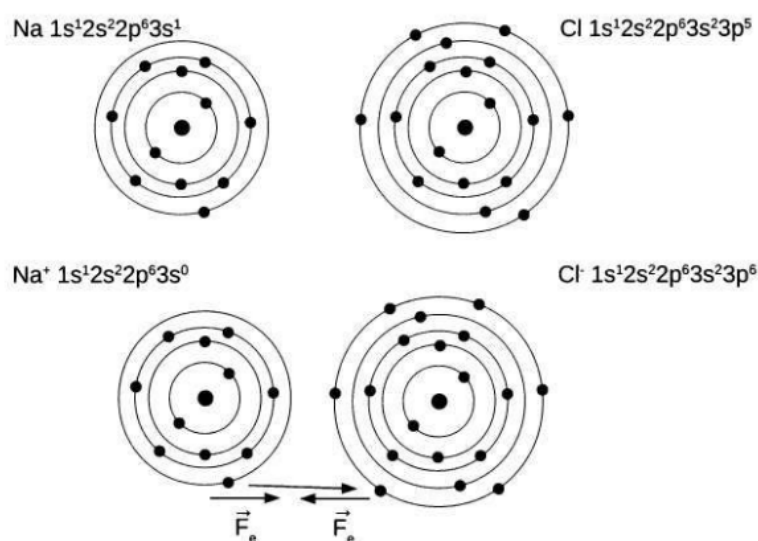
► iontová vazba

Iontovou vazbu tvoří ionty, které jsou vzájemně přitahovány elektrostatickými silami.

Typický typ pro dvouatomové molekuly obsahující atomy z prvního (*prvky alkalických zemin*) a sedmého (resp. sedmnáctého) sloupce (*halogeny*) periodické tabulky, např.: HCl, HF, NaCl, KI, ...

Prvky alkalických zemin mají o jeden elektron navíc (a ještě k tomu tlustej), proto se ho rády zbaví.

Halogeny mají o jeden elektron na míň (a ještě k tomu hubenej), proto jej rády přijmou.



Obrázek 6.2: Vznik molekuly NaCl vytvořením iontové vazby mezi ionty Na^+ a Cl^- .

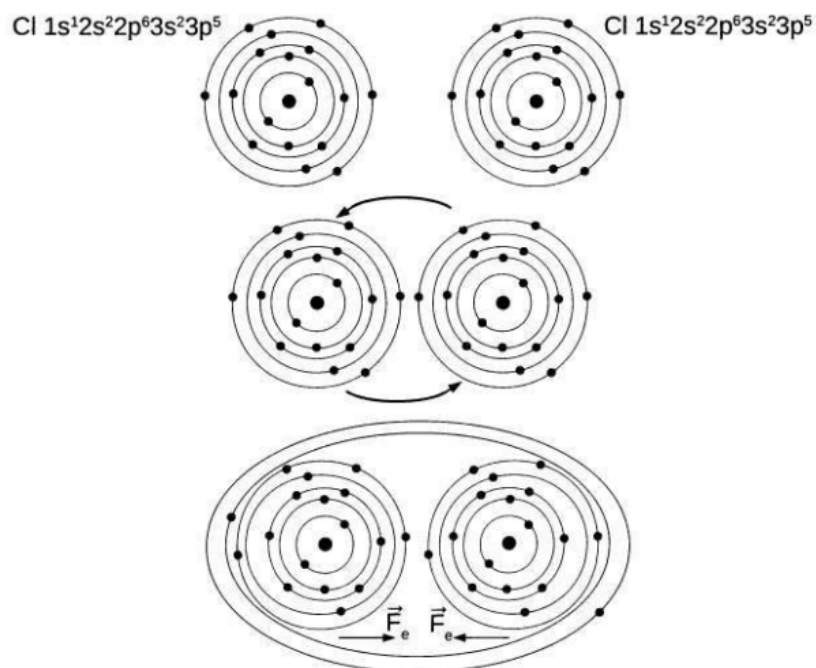
Pozn.: Iontové sloučeniny se rozpouštějí ve vodě (polární rozpouštědlo) ale nerozpouštějí se v organických (nepolárních) rozpouštědlech, např. benzínu.

²⁵Daniš, str. 319

► kovalentní vazba

Kovalentní vazba je sdílením valenčních elektronů mezi atomy molekuly (tzv. elektronový komunismus)

Vlivem sdílení elektronů dojde k deformaci elektronových orbitalů a tím i k vytvoření elektrostatických sil, které zajišťují stabilitu nově vzniklé molekuly.



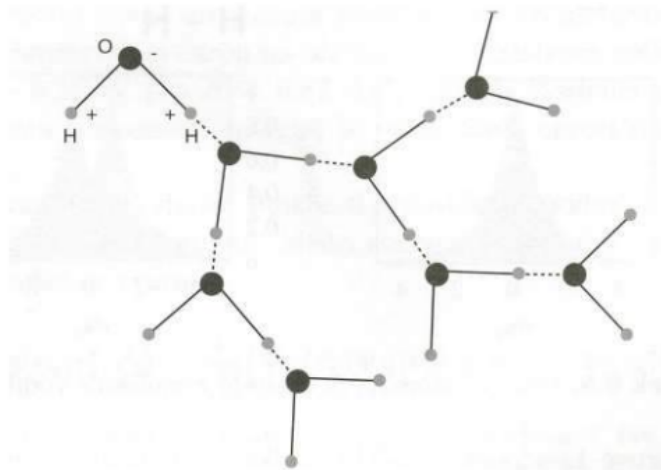
Obrázek 6.3: Vznik kovalentní vazby mezi atomy chlóru.

Pozn.: Sloučeniny s kovalentní vazbou se rozpouštějí v organických (nepolárních) rozpouštědlech, např. benzínu, ale nerozpouštějí se ve vodě - třeba jód I_2 .

► van der Waalsova vazba

Není chemickou vazbou v pravém slova smyslu

Vzniká z elektrostatického přitahování mezi naindukovanými dipóly mezi atomy/molekulami



Obrázek 6.4: Shluk molekul vody vázaných dipólovými interakcemi (čárkované linie).

U vody zvyšuje teplotu tání a varu. Gekon ji využívá pro šplhání po kluzkých površích.

► kovová vazba

Speciální typ kovalentní vazby, kdy jsou valenční elektrony sdíleny celým krystalem, nikoliv pouze atomy, které tvoří vazbu. Umožňuje kovům vést elektrický proud.

Více vizte v bodu [Blochův teorém](#) a [pásová struktura](#)

■ **HYBRIDIZACE**²⁶

Chemické vazby se účastní elektronové orbitály s nespárovanými elektrony.

Na základě této představy ale nedokážeme vysvětlit existenci sloučenin, jako je metan CH₄ ani čtyřvaznost uhlíku (měl by být dvojbazný) a celou organickou chemii.

Nedokážeme vysvětlit ani existenci sloučenin jako BeH₂ či BH₃

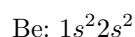
Řešením je připustit lineární kombinace orbitalů (s, p, d, ...). Takto vzniklé (kombinované) orbitály nazýváme jako **hybridní**. Hybridní orbitály vznikají právě tehdy, když je jejich uspořádání **energeticky výhodnější**, než uspořádání původních orbitalů

3 nejznámější hybridní orbitály: **sp**, **sp²**, **sp³** (kde číslo značí počet elektronů v daném orbitalu)

► **hybridizace sp**

Představíme si na molekule BeH₂

Elektronová konfigurace atomu berylia je



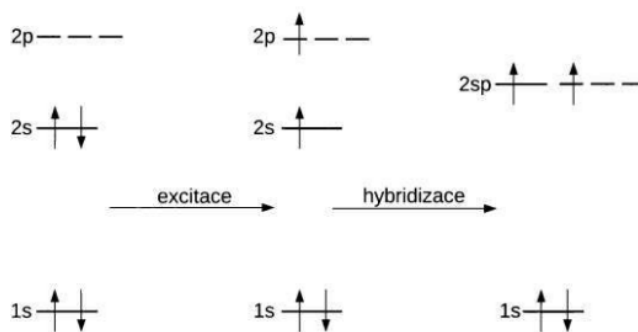
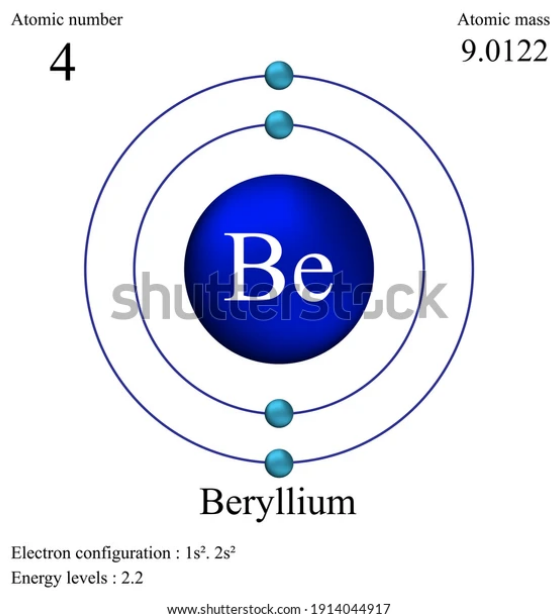
Jeho s orbitály jsou tak zcela zaplněné. Pro Be je tak energeticky výhodné excitovat jeden 2s elektron do 2p orbitalu.

Poté dojde k energetickému sjednocení 2s a 2p za vzniku **hybridního 2sp**, který může být obsazen až 8 elektrony! A to se vyplatí!

Nově vzniklý orbital je definován vlnovou funkcí:

$$\psi_{sp} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2s} \pm \psi_{2p_z})$$

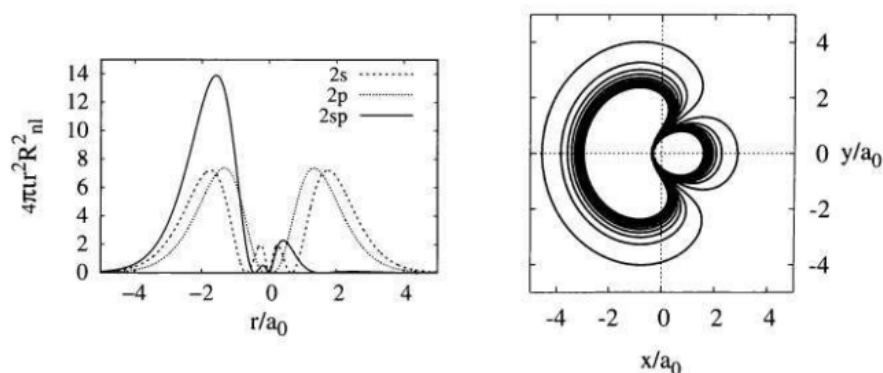
kde jsme ze tří orbitalů 2p z $m = \{-1, 0, 1\}$ vybrali 2p_z ($m = 0$)



Obrázek 6.14: Hybridizace elektronových orbitalů 2s a 2p u atomu berylia. Nejdříve dojde k excitaci jednoho 2s elektronu na hladinu 2p a poté k vytvoření hybridního orbitalu 2sp.

²⁶Daniš, str. 341-345

Hybridní orbital má jinou symetrii než původní atomové orbitály!



Obrázek 6.15: Vlevo: Radiální elektronová hustota orbitalů $2s$, $2p_z$ a hybridního orbitalu $2sp$. Vpravo: Elektronová hustota daná $|\psi_{sp}|^2$ dle vztahu 6.35 pro kladné znaménko.

► hybridisace sp^2

Představíme si na molekule BH_3

Elektronová konfigurace atomu boru je

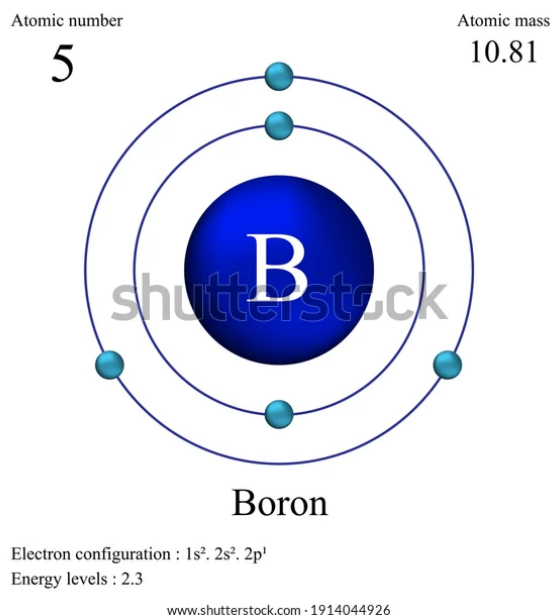
$$B: 1s^2 2s^2 2p^1$$

Jelikož se chemické vazby zúčastňují jen nespárované elektrony, mohl by bór tvořit pouze jednovazné sloučeniny.

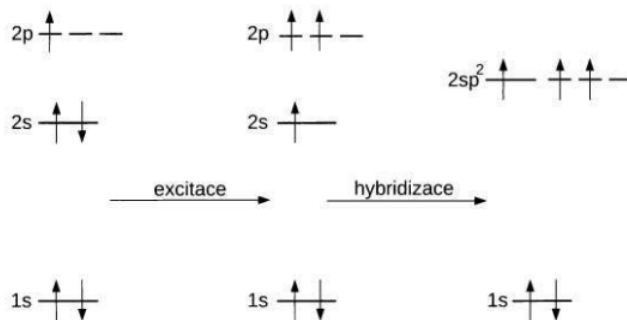
Označení sp^2 odpovídá počtu elektronů v s a p orbitalech, které tvoří hybridní orbital.

V hybridním orbitalu jsou tak k dispozici pro chemickou vazbu 3 nespárované elektrony.

Vlnové funkce hybridního orbitalu budeme opět hledat jako lineární kombinaci atomových orbitalů $2s$, $2p_z$ a například $2p_x$

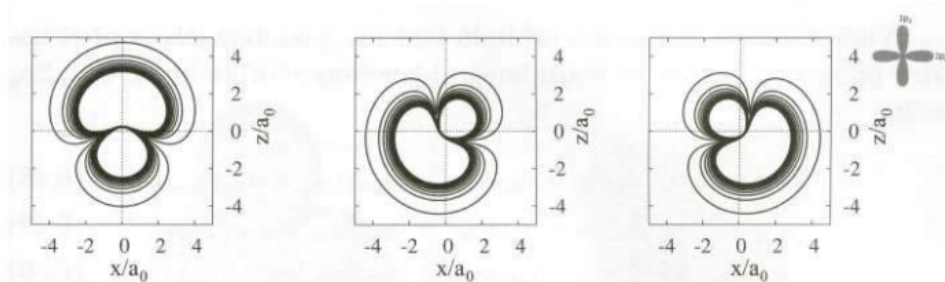


$$\begin{aligned}\psi_{sp^2,1} &= a_s \psi_{2s} + a_{pz} \psi_{2s} + a_{px} \psi_{2p_x} \\ \psi_{sp^2,2} &= b_s \psi_{2s} + b_{pz} \psi_{2s} + b_{px} \psi_{2p_x} \\ \psi_{sp^2,3} &= c_s \psi_{2s} + c_{pz} \psi_{2s} + c_{px} \psi_{2p_x}\end{aligned}$$



Obrázek 6.16: Hybridizace elektronových orbitalů $2s$ a $2p$ u atomu bóru. Jako v případě sp orbitalu, dojde nejdříve k excitaci jednoho $2s$ elektronu na hladinu $2p$ a poté k vytvoření hybridního orbitalu $2sp^2$.

U sp^2 nám vzniká nový typ symetrie, kterou původní orbitály neměly - trojčetná symetrie!

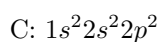


Obrázek 6.17: $|\psi_{sp^2,i}|^2$ funkcí dle vztahů 6.45–6.47. Na rozdíl od atomových $2p$ orbitalů, které jsou na sebe kolmé (viz vložený obrázek vpravo nahoře), máme tři orbitály s trojčetnou symetrií.

► hybridisace sp^3

Představíme si na molekule CH_4

Elektronová konfigurace atomu uhlíku je



Je pro něj energeticky výhodnější vytvořit hybridní orbital sp^3 .

Díky tomu má k vazbě k dispozici 4 nespárované elektrony a díky tomu je uhlík čtyřvazný, což umožňuje vznik organických sloučenin.

Vlnové funkce hybridních orbitalů bychom jako v předchozích případech hledali ve tvaru lineární kombinace orbitalů $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$.

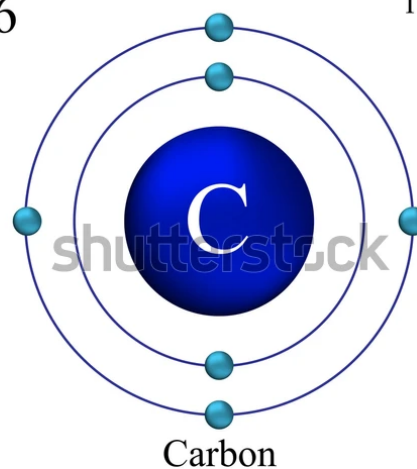
Kde opět požadujeme, aby funkce $\psi_{sp^3,i}$ byly normované a ortogonální.

Atomic number

6

Atomic mass

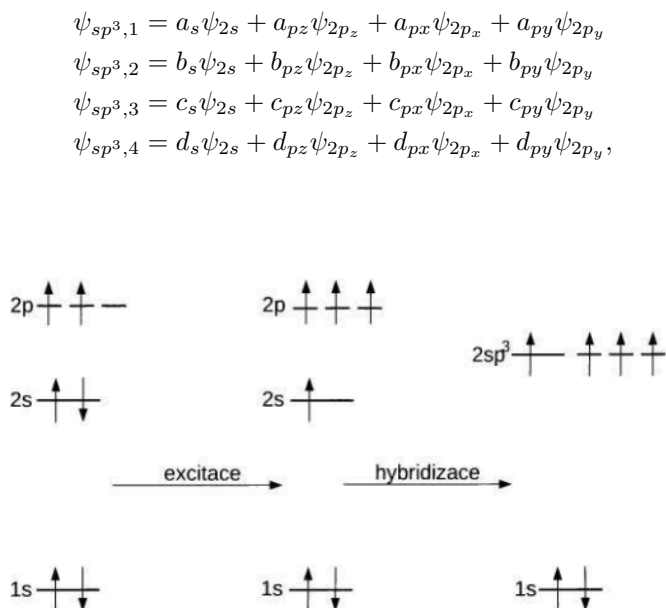
12.011



Electron configuration : $1s^2, 2s^2, 2p^2$

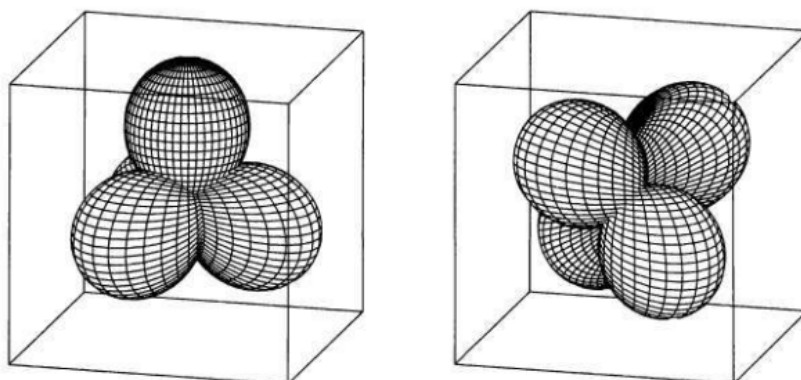
Energy levels : 2,4

www.shutterstock.com · 1914333274



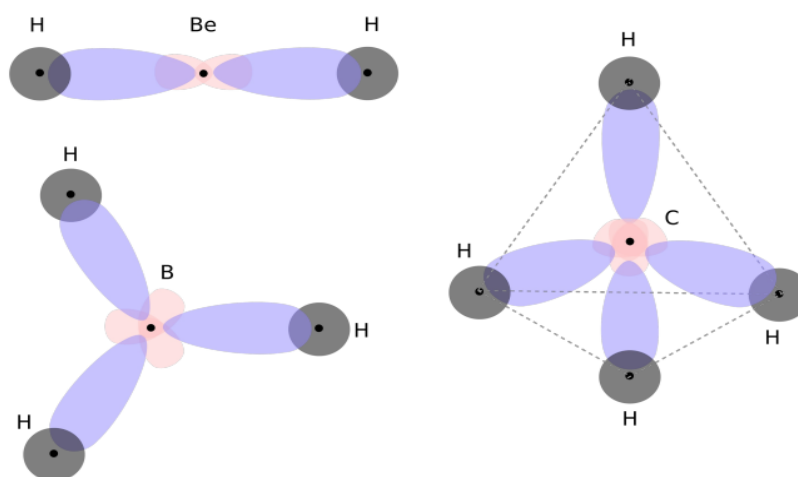
Obrázek 6.18: Hybridizace elektronových orbitalů $2s$ a $2p$ u atomu uhlíku. Jako v případě sp a sp^2 orbitalů, dojde nejdříve k excitaci jednoho $2s$ elektronu na hladinu $2p$ a poté k vytvoření hybridního orbitalu $2sp^3$.

Prostorové rozložení náboje je opět jiné než u původních atomových orbitalů $2s$ a $2p$



Obrázek 6.19: Rozložení konstantní hodnoty elektronové hustoty $\psi_{sp^3,i}$ hybridního orbitalu sp^3 dle funkcí 6.52–6.55 (vlevo) a 6.56–6.59 (vpravo). Na rozdíl od atomových $2p$ orbitalů, které jsou na sebe kolmé, svírají jednotlivé „laloky“ sp^3 orbitalů úhel $109,5^\circ$.

Tvary všech tří zmíněných hybridisovaných orbitalů jsou na následujícím obrázku:



Obrázek 6.20: Schématické zobrazení tvarů molekul tvořených hybridními orbitaly – BeH_2 ($2sp$ orbital), BH_3 ($2sp^2$ orbital) a CH_4 ($2sp^3$ orbital).

■ BLOCHŮV TEORÉM²⁷

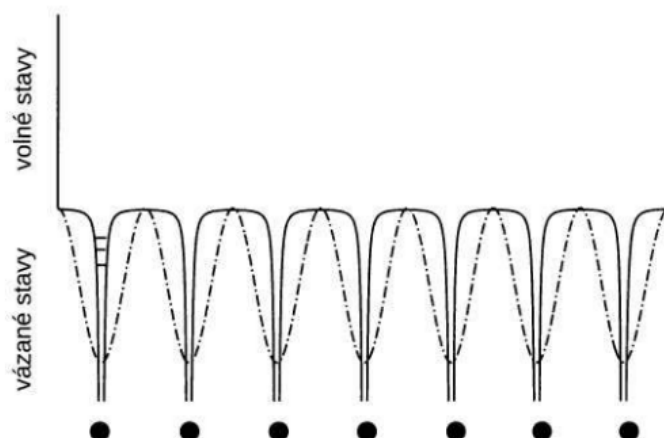
Jak již bylo zmíněno v kovech jsou elektrony sdíleny celým krystalem. První pokusy o popis tohoto fenoménu vedly skrze nazírání na elektrony v kovech jako na ideální elektronový plyn (Drude).

Nicméně v reálných kovech se elektrony pohybují v krystalické mřížce, tedy aby theorie seděla s experimentem, musíme započítat do jejich chování i periodicky se opakující potenciálové působení jader mřížky.

$\gamma(\text{mJ} \cdot \text{mol}^{-1} \text{K}^{-2})$											
	Li	Na	K	Fe	Mn	Cu	Zn	Ag	Au	Al	Ga
volné el.	0.8	1.1	17	0.6	0.6	0.5	0.8	0.6	0.6	0.9	1.0
experiment	1.6	1.4	2.1	4.6	15.2	0.7	0.6	0.6	0.7	1.3	0.6

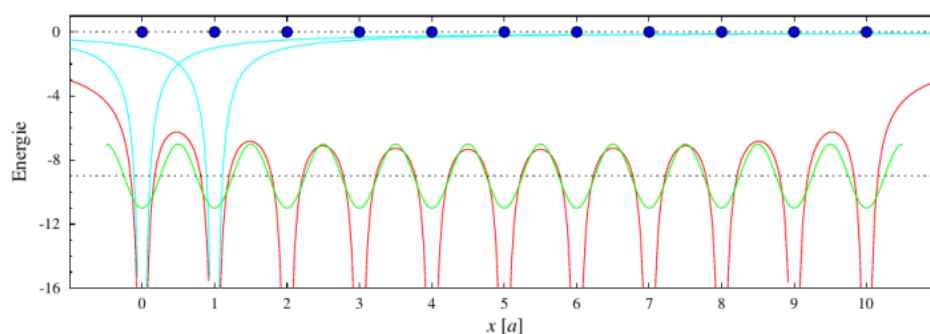
$$\downarrow \text{efektivní hmotnost } m^* \quad \frac{m^*}{m_e} = \frac{\gamma_{exp}}{\gamma_{volne}}$$

²⁷Daniš, str. 359



Obrázek 6.27: Schématické znázornění periodického potenciálu, ve kterém se pohybují vodivostní elektrony. Jsou vyznačeny tři hladiny vázaných stavů v potenciálu prvního atomu. Přerušovaná linie odpovídá aproximaci potenciálu jedinou periodickou funkcí – funkcí kosinus. Viz text.

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů



Blochův teorém

V dokonalém periodickém potenciálu krystalu lze napsat řešení Schrödingerovy rovnice ve tvaru rovinné vlny vynásobené periodickou funkcí, která má periodu shodnou s periodou krystalu.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}}$$

Elektrony, jejichž stavy *přes celý krystal* lze popsat pomocí Blochova teorému, se nazývají **Blochovy elektrony**.

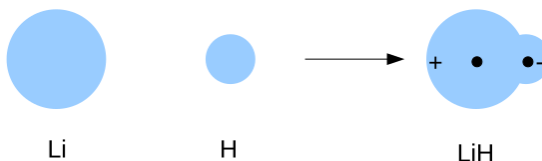
■ **ELEKTRONEGATIVITA** = „relativní snaha atomu přitahovat sdílené elektrony“²⁸

Pojí se s kovalentní vazbou. Pokud je rozdíl elektronegativit atomů velký, může se molekula chovat jako elektrický dipól.

→ Atomový poloměr se zmenšuje → Ionizační energie vzrůstá → Elektronegativita vzrůstá →

Skupina	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Perioda																		
1	H 2.20																	He 3.89
2	Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne 3.67
3	Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar 3.3
4	K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00
5	Rb 0.82	Sr 0.99	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.6
6	Cs 0.79	Ba 0.89	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn 2.2
7	Fr 0.7	Ra 0.9	**	Rf 1.3	Db 1.5	Sg 2.36	Bh 1.9	Hs 2.2	Mt 2.20	Ds 2.28	Rg 2.54	Cn 2.00	Uut 1.62	Fl 2.33	Uup 2.02	Lv 2.0	Uus 2.2	Uuo 2.2
Lanthanoidy	*	La 1.1	Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.13	Sm 1.17	Eu 1.2	Gd 1.2	Tb 1.1	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.1	Lu 1.27		
Aktinoidy	**	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.38	Np 1.36	Pu 1.28	Am 1.13	Cm 1.28	Bk 1.3	Cf 1.3	Es 1.3	Fm 1.3	Md 1.3	No 1.3	Lr 1.291		

LiH



Rozdíl elektronegativit < 0,7 ⇒ sloučenina je **nepolární**

Rozdíl elektronegativit > 0,7 ⇒ sloučenina je **polární**

■ **ELEKTRONOVÁ AFINITA** = „jak ochotně se atom stane aniontem“²⁹

Energie uvolněná přidáním elektronu k neutrálnímu atomu (uplatňuje se u iontové vazby)

■ **IONISAČNÍ ENERGIE** = „jak ochotně se atom stane kationtem“³⁰

Energie nutná k odebrání jednoho elektronu atomu (uplatňuje se u iontové vazby)



²⁸Daniš, str. 323

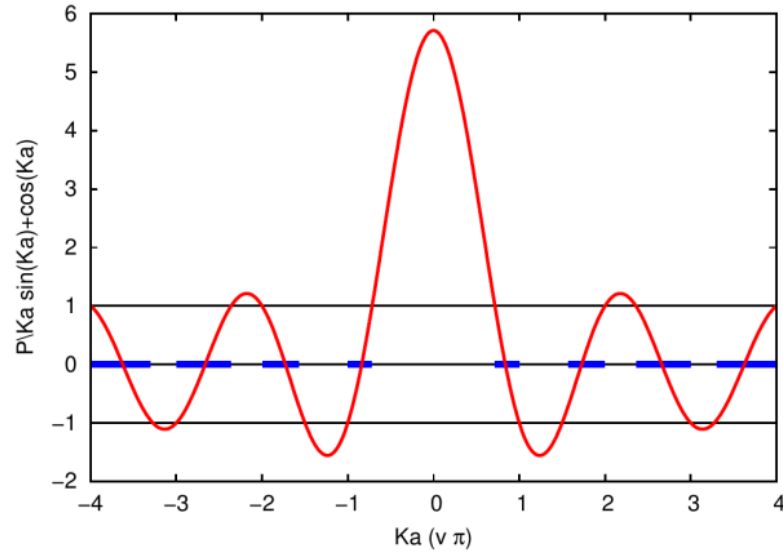
²⁹Daniš, str. 321

³⁰Daniš, str. 321

► povolené a zakázané pásy

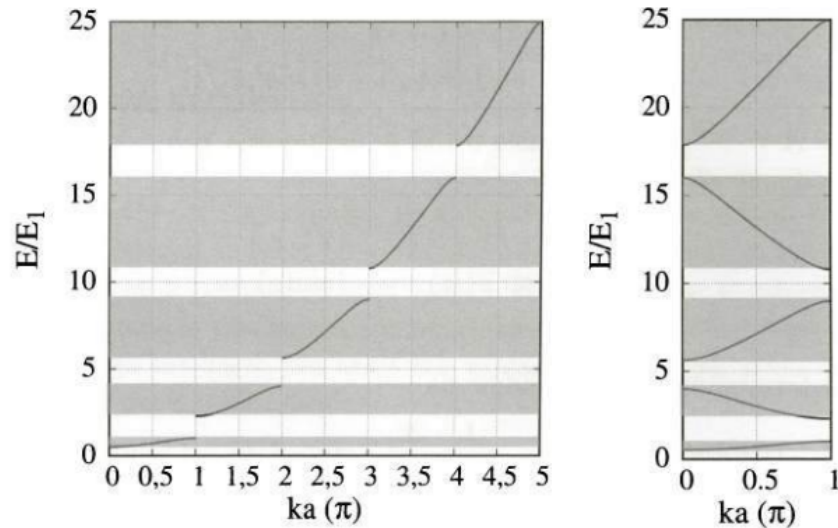
Kronigův-Penneyův model periodických pravoúhlých potenciálových jam vede na vztah:

$$\frac{P}{Ka} \sin(Ka) + \cos(Ka) = \cos(ka)$$



Cosinus je však omezená funkce s oborem hodnot $[-1, 1]$, takže některé hodnoty vlnového čísla k jsou zakázány (tam, kde je absolutní hodnota pravé strany >1)!

Vznikají tak pásy dovolených energií (šedé) mezi kterými jsou pásy energií zakázaných (bílé).



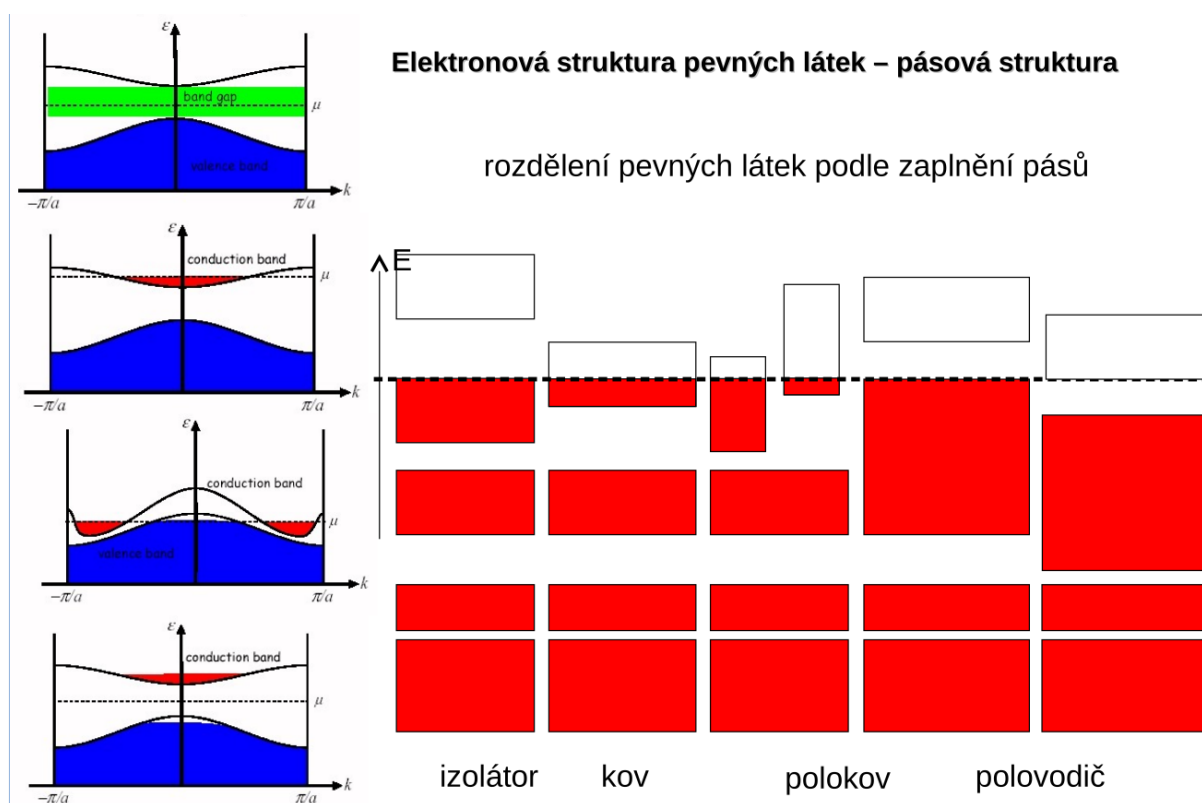
Obrázek 6.31: Disperzní relace Kronigova–Penneyova modelu v limitním případě pro $P = 5$. Šedé zóny označují pásy dovolených energií. Nalevo rozšířené schéma, vpravo redukované schéma v první Brillouinově zóně.

S rostoucí energií se šířka povolených pásů zvětšuje a šířka zakázaných pásů zužuje.

Hodnota $P = 0$ odpovídá volnému elektronu, v takovém případě se na hranicích BZ žádné pásy zakázaných energií neobjeví.

³¹Daniš, str. 371

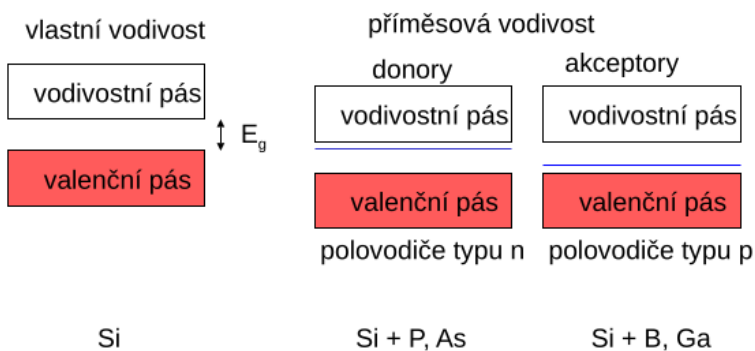
Pásová struktura dovede vysvětlit, proč jsou některé látky vodiče, jiné polovodiče a jiné izolanty:



Zakázaný pás v izolantech je přímo nad valenční vrstvou, elektrony tak nejsou ochotné excitovat se do vodivostního pásu a kladou odpor (jsou odporné).

Kovy naopak končí v půlce povoleného pásu, snadno tak excitují své elektrony z valenčního pásu do vodivostního pásu.

Polovodiče jsou za normálních podmínek spíše izolanty, ale jejich zakázaný pás je dostatečně úzký, aby pomocí vnějších podmínek, např. zvýšením teploty a přidáním příměsí, mohly začít vodit.



$$E_{d,a} = \frac{e'^4 m^*}{2\hbar^2 \epsilon}$$

- NAKRESLIT A POPSAT JEDNODUCHÉ A SLOŽENÉ PRVKY SYMETRIE, VČETNĚ MATEMATICKÉHO POPISU

STR 103

- POROVNAT BODOVOU A PROSTOROVOU GRUPU KRYSTALU

STR 110

- VYSVĚTLIT A NA PŘÍKLADĚ UKÁZAT DŮSLEDKY ZAVEDENÍ TRANSLAČNÍ SYMETRIE V KRYSTALECH

STR 158

- POROVNAT LAUEOVY A BRAGGOVY DIFRAKČNÍ PODMÍNKY A PROKÁZAT JEJICH EKVIVALENCI Millerovy a difrakční indexy

Laueovy difrakční podmínky:

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{q} = 2\pi h$$

$$\vec{a}_2 \cdot \vec{q} = 2\pi k$$

$$\vec{a}_3 \cdot \vec{q} = 2\pi l$$

Tyto difrakční podmínky jsou splněny, pokud je vektor $\vec{q}$ součástí reciproké mříže a lze tak vytvářet ve tvaru:

$$\vec{q} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \equiv \vec{B}_{hkl}$$

Platí: Jeden bod v reciprokém prostoru odpovídá v přímém prostoru *osnově rovin* vzdálených od sebe d_{hkl}

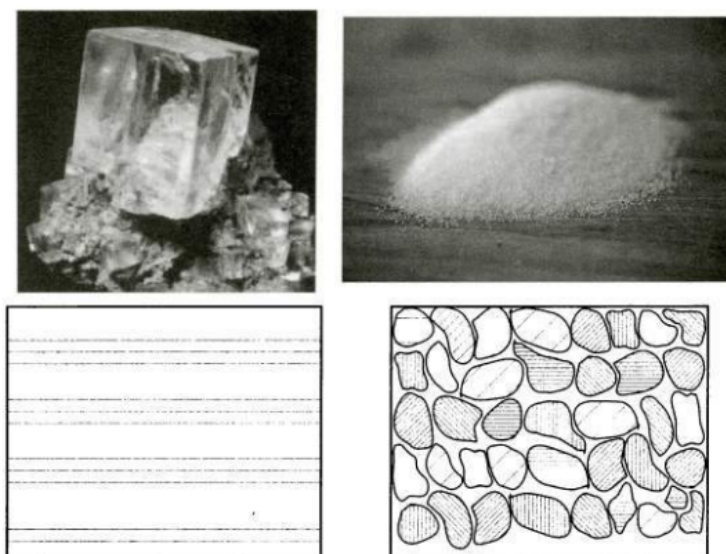
STR 198

- OBJASNIT POJEM STRUKTURNÍ A ROZPTYLOVÝ FAKTOR A UVÉST, JAK SOUVISÍ S USPOŘÁDÁNÍM ATOMŮ V LÁTCE/MOLEKULE

STR 210-211

- VYSVĚTLIT ROZDÍL MEZI POLYKRISTALEM A MONOKRYSTALEM A S JEHO POMOCÍ NA ZÁKLADĚ PŘEDLOŽENÉHO DIFRAKČNÍHO ZÁZNAMU ROZHODNOUT, KTERÝ Z NICH POPISUJE

STR 208



Obrázek 3.42: Porovnání monokrystalu a polykrystalu. V monokrystalu jsou atomové roviny stejně orientovány v celém krystalu, polykrystalický vzorek je tvořen náhodně orientovanými krystalicity.

- POPSAT RŮZNÉ METODY RŮSTU A PŘÍPRAVY KRYSTALICKÝCH LÁTEK (POLYKRYSTALICKÝCH, MONOKRYSTALICKÝCH)

PRAESENTACE - KŘEMÍK, slovensky krémík, mňam

STR 181

- VYLOŽIT PRINCIP DIFRAKCE RTG. ZÁŘENÍ NA (MONO/POLY) KRYSTALU, VČETNĚ CHARAKTERISTIK STRUKTURY ZJISTITELNÝCH Z DIFRAKČNÍHO ZÁZNAMU

STR 201

- POMOCÍ EWALDOVY KONSTRUKCE VYLOŽIT VZNIK DIFRAKČNÍHO ZÁZNAMU NA MONOKRYSTALU A ZDŮVODNIT ROZDÍLNOST ZÁZNAMŮ PŘI POUŽITÍ FOTONŮ A ELEKTRONŮ

STR 200

- VYSVĚTLIT, JAK STRUKTURA LÁTKY OVLIVŇUJE JEJÍ FYZIKÁLNÍ VLASTNOSTI, VČETNĚ UKÁZKY APLIKACE NEUMANNOVA, VOIGTOVA A CURIEOVA PRINCIPU

STR 171-173

- ODHADNOUT SYMETRII DIFRAKČNÍHO ZÁZNAMU LAUEOVOU METODOU ZE ZADANÉ GEOMETRIE EXPERIMENTU

STR 221

- ODHADNOUT ZMĚNU DIFRAKČNÍHO ZÁZNAMU PŘI ZMĚNĚ KRYSTALOVÉ STRUKTURY (NAPŘÍKLAD BCC $\rightarrow$ fcc , KUBICKÁ $\rightarrow$ TETRAGONÁLNÍ)

STR 215 VYHASÍNÁNÍ

- POROVNAT METODY ROZPTYLU FOTONŮ/ELEKTRONŮ/NEUTRONŮ
- VYSVĚTLIT PRINCIPY ELEKTRONOVÝCH MIKROSKOPŮ (TEM/SEM) A UVÉST PŘÍKLADY POUŽITÍ

STR 164-168

- PROKÁZAT NA VHODNÉM EXPERIMENTU DUÁLNÍ VLASTNOSTI (VLNA/ČÁSTICE) FOTONŮ

STR 260 - interference (Youngův) vs. fotoefekt

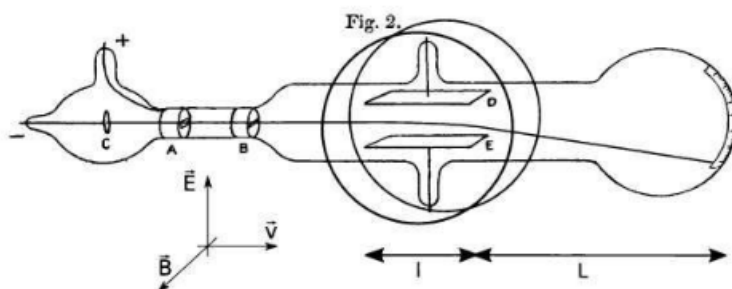
- PROKÁZAT NA VHODNÉM EXPERIMENTU DUÁLNÍ VLASTNOSTI (VLNA/ČÁSTICE) ELEKTRONŮ

STR 260 - Youngův DVOJŠTĚRBINOVÝ EXPERIMENT s elektrony

- VYSVĚTLIT PRINCIP THOMSONOVA EXPERIMENTU OBJEVU ELEKTRONU VČETNĚ HISTORICKÝCH SOUVISLOSTÍ A JEHO DŮSLEDKY PRO POZNÁNÍ STRUKTURY ATOMŮ³²

Thomson zkoumal „záhadné katodové paprsky”, jejich elektrický náboj byl ověřen nabíjením elektroskopu.

Lepším vyčerpáním katodové trubice se mu podařilo naměřit vychýlení katodových paprsků vlivem elektrického pole.



Obrázek 1.10: Náčrt aparatury použité J.J. Thomsonem. Převzato z [10] a upraveno.

³²Daniš, str. 25

Působením elektrického pole $\vec{E}$ dojde k odchýlení směru šíření katodových paprsků.

Elektrické pole působí na nabitě částice silou

$$F_e = qE$$

Působením magnetického pole můžeme vliv elektromagnetického pole kompenzovat a vynulovat tak výchylku:

$$qE = F_e = F_m = q|\vec{v} \times \vec{B}| = vqB \rightarrow v = \frac{E}{B}$$

- **PŘEDSTAVIT HISTORICKÉ SOUVISLOSTI RUTHERFORDOVA EXPERIMENTU, OBJASNIT JEHO PRINCIP A POSODIT JEHO DŮSLEDKY PRO POZNÁNÍ STRUKTURY LÁTEK**

STR 34

- **VYSVĚTLIT SOUVISLOST VNĚJŠÍHO FOTOEFEKTU S ELEKTRONOVOU STRUKTUROU KOVŮ**

STR 235

- **POROVNAT A VYSVĚTLIT FYZIKÁLNÍ PRINCIPY A POUŽITÍ METOD - HEED, RHEED, LEED, AFM, STM, EDX**

STR 249

- **POPSAT VZNIK RTG. ZÁŘENÍ (RTG. LAMPY, SYNCHROTRON) A UVÉST, JAK LZE Z RTG. SPEKTRA ZJISTIT ATOMOVÉ ČÍSLO PRVKU, KTERÝ ZÁŘENÍ EMITUJE (MOSELEYŮV ZÁKON)**
- **OBJASNIT, JAK VNITŘNÍ POHYBY MOLEKUL PŘÍSPÍVAJÍ K MĚRNÉMU TEPLU PLYNŮ**

STR 279

- **VYLOŽIT, JAK LZE VNITŘNÍ POHYBY MOLEKUL STUDOVAT POMOCÍ SPEKTROSKOPICKÝCH METOD, VČETNĚ OBJASNĚNÍ ROZDÍLU MEZI R A P VĚTVÍ SPEKTRA**

STR 134

- **VYSVĚTLIT DISPERZNÍ RELACE KMITŮ JEDNO/DVOU ATOMOVÝCH ŘETÍZKŮ, VČETNĚ APLIKACE PERIODICKÝCH OKRAJOVÝCH PODMÍNEK**

STR 296

- **OBJASNIT TERMÍN BRILLOUINOVA ZÓNA, VYSVĚTLIT JEJÍ POUŽÍVÁNÍ (NEJEN) PŘI STUDIU KMITŮ ATOMŮ V KRYSTALOVÉ MŘÍŽI A ZAKRESLIT JI V PŘÍPADĚ JEDNODUCHÝCH STRUKTUR (ČTVERCOVÁ, KUBICKÁ MŘÍŽ)**

STR 284

- **POROVNAT DEBYEŮV A EINSTEINŮV MODEL MĚRNÉHO TEPLA PEVNÝCH LÁTEK**

STR 280 + PRAESENTACE

- **VYSVĚTLIT PRINCIP MĚŘENÍ FONONŮ POMOCÍ ROZPTYLU NEUTRONŮ**

STR 312

- **POPSAT VLIV VIBRACÍ ATOMŮ NA DIFRAKČNÍ ZÁZNAM KRYSTALU**

STR 314

- **POROVNAT RUTHERFORDŮV A BOHRŮV MODEL ATOMU**

STR 34, 47

- **VYLOŽIT VZNIK SPEKTRA ATOMŮ NA ZÁKLADĚ BOHROVA MODELU ATOMU, VČETNĚ VLIVU IZOTOPU PRVKU A ZMĚNY ELEKTRONU ZA JINOU ČÁSTICI**

STR 49

- **VYSVĚTLIT OMEZENÍ BOHROVA MODELU ATOMU**

STR 64

- VYLOŽIT FYZIKÁLNÍ PRINCIP HARTREEHO A HARTREEHO-FOCKOVY METODY VČETNĚ JEJÍHO POUŽITÍ

STR 76

- POPSAT A OBJASNIT PRINCIP STERNOVA-GERLACHOVA EXPERIMENTU

STR 71

- URČIT ZMĚNU VÝSLEDKU STERNOVA-GERLACHOVA EXPERIMENTU PŘI ZMĚNĚ PRVKU POUŽITÉHO V TOMTO EXPERIMENTU

STR 71

- VYSVĚTLIT PRINCIP FRANKOVA-HERTZOVA EXPERIMENTU A JEHO SOUVISLOST S BOHROVÝM MODELEM ATOMU

STR 51

- POROVNAT NORMÁLNÍ A ANOMÁLNÍ ZEEMANŮV JEV (Z HLEDISKA EXPERIMENTU I FYZIKÁLNÍHO POPISU)

STR 64 a 88

- VYSVĚTLIT, ČÍM A JAK JE URČENA POLOHA PRVKU V PERIODICKÉ TABULCE

STR 323

- OBJASNIT A NA PŘÍKLADU UKÁZAT VLIV KVANTOVÁNÍ ENERGIE A MOMENTŮ HYBNOSTI NA STRUKTURU ATOMOVÝCH SPEKTER

- VYSVĚTLIT PRŮBĚH ZÁVISLOSTI ATOMOVÝCH POLOMĚRŮ A IONIZAČNÍCH ENERGIÍ NA ATOMOVÉM ČÍSLE

STR 323

- OBJASNIT VZNIK CHEMICKÝCH VAZEB VČETNĚ KVANTOVÉHO POPISU (METODA VALENČNÍ VAZBY, LCAO, ATOMOVÉ VS. MOLEKULOVÉ ORBITALY)

STR 320, 331

- VYLOŽIT A NA PŘÍKLADECH UKÁZAT VZNIK HYBRIDIZOVANÉ CHEMICKÉ VAZBY, VČETNĚ POPISU, JAK SE LIŠÍ OD „KLASICKÉ" CHEMICKÉ VAZBY

STR 341

- POROVNAT DRUDEHO A SOMMERFELDŮV MODEL VOLNÝCH ELEKTRONŮ

STR 348

- VYSVĚTLIT ELEKTRONOVÝ PŘÍSPĚVEK K MĚRNÉMU TEPLU A POROVNAT JEJ Z HLEDISKA MODELŮ VOLNÝCH A TĚMĚŘ VOLNÝCH ELEKTRONŮ

STR 348 a 358

- POMOCÍ KRONIGOVA-PENNEYOVA MODELU OBJASNIT VZNIK PÁSOVÉ STRUKTURY PEVNÝCH LÁTEK

STR 366

- NA ZÁKLADĚ PÁSOVÉ TEORIE VYSVĚTLIT ELEKTRICKÉ A OPTICKÉ VLASTNOSTI KOVŮ, POLOVODIČŮ A IZOLANTŮ

STR 366, PRAESENTACE

- ODHADNOUT, JAK SOUVISÍ ELEKTRONOVÁ STRUKTURA A MAGNETICKÉ VLASTNOSTI ATOMŮ

STR 70