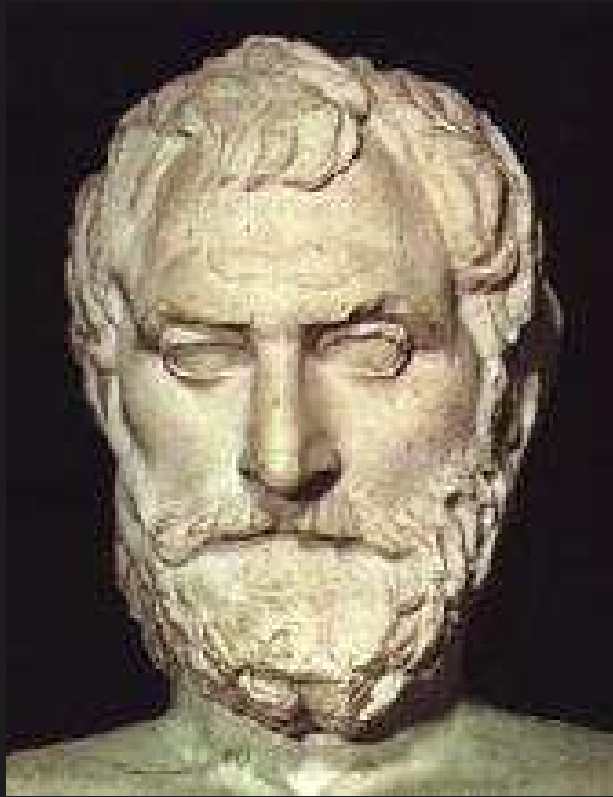


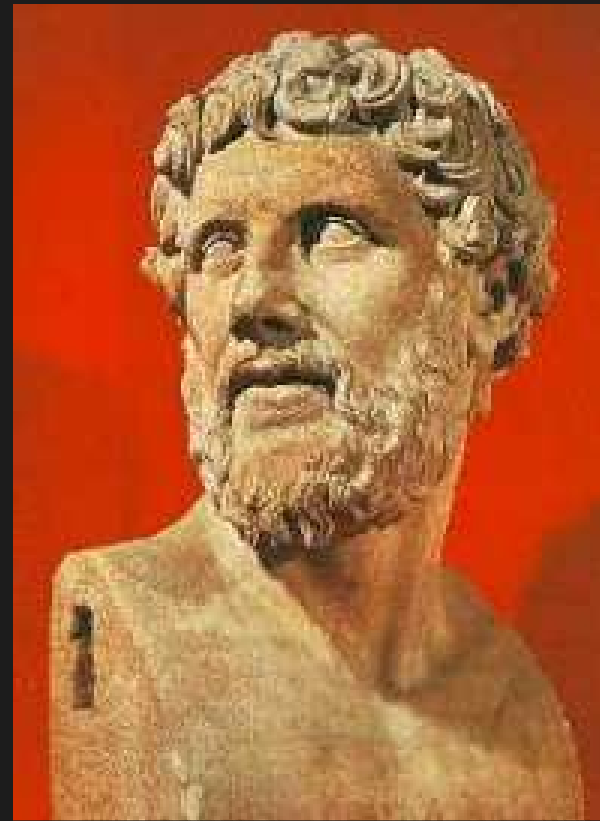
# **Atomová a jaderná fyzika**

# 1. Vývoj představ o atomu

- V. stol. př. K.



Leukippos (~460-370)



Demokritos (~470-371)

## 1. 1. Historie do objevu elektronu

- 1808 Dalton – zákon stálých poměrů slučovacíh
- 1811 Avogadro – molekula, atom Avogadrovo číslo

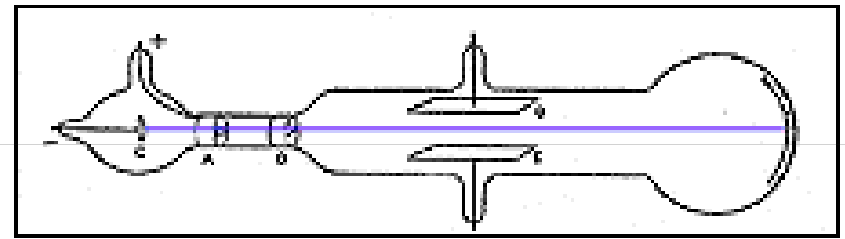
$$N = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$



**John Dalton (1766-1844) Amadeo Avogadro (1776-1856)**

## 1. 1. Historie do objevu elektronu

- 1833 – Faradayovy zákony elektrolýzy
- 1859 – objev katodových paprsků



$$F = 9,65 \cdot 10^4 \text{ C}$$



Michael Faraday (1791-1867)



J. J. Thomson (1856-1940)

## 1. 1. Historie do objevu elektronu

- 1898 – objev elektronu
- 1900 – George Johnstone Stoney – název elektron

$$\frac{e}{m} = 1,759 \cdot 10^{11} \text{ C} \cdot \text{kg}^{-1}$$



J. J. Thomson (1856-1940)

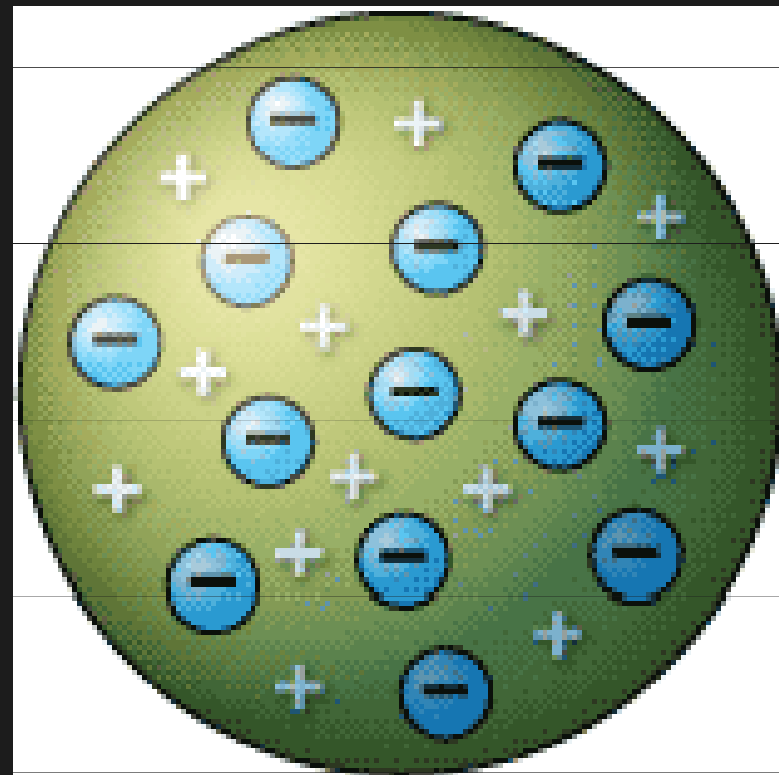


## 1. 2. První modely atomu

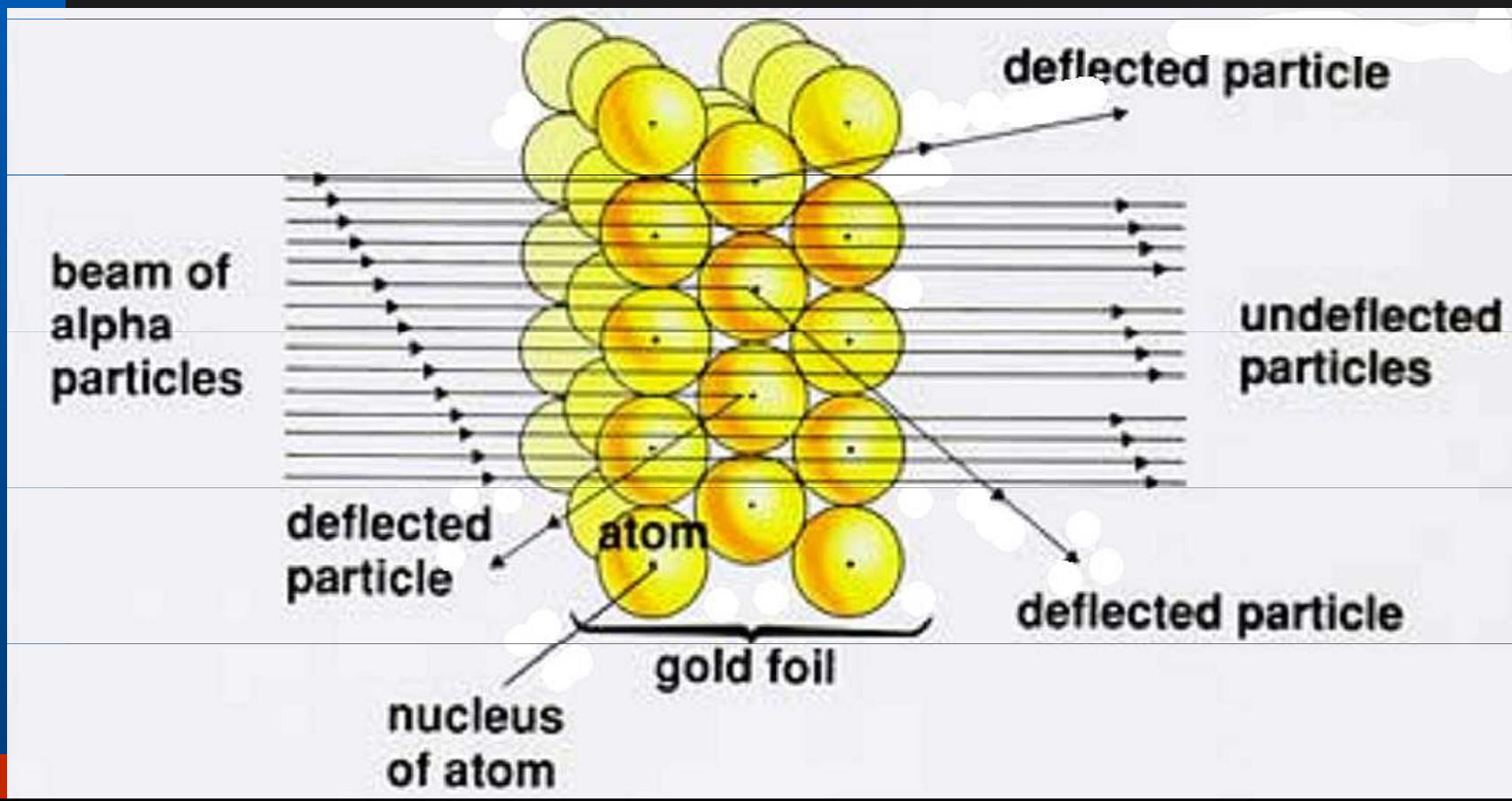
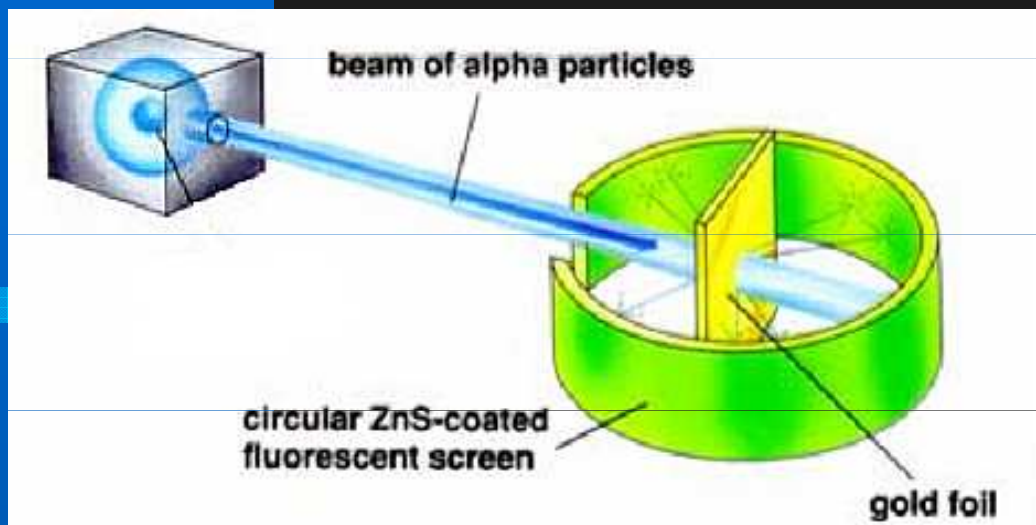
- 1898 – pudinkový model atomu: J. J. Thomson



J. J. Thomson (1856-1940)



# Rutherfordův rozptyl $\alpha$ -částic na atomových jádrech

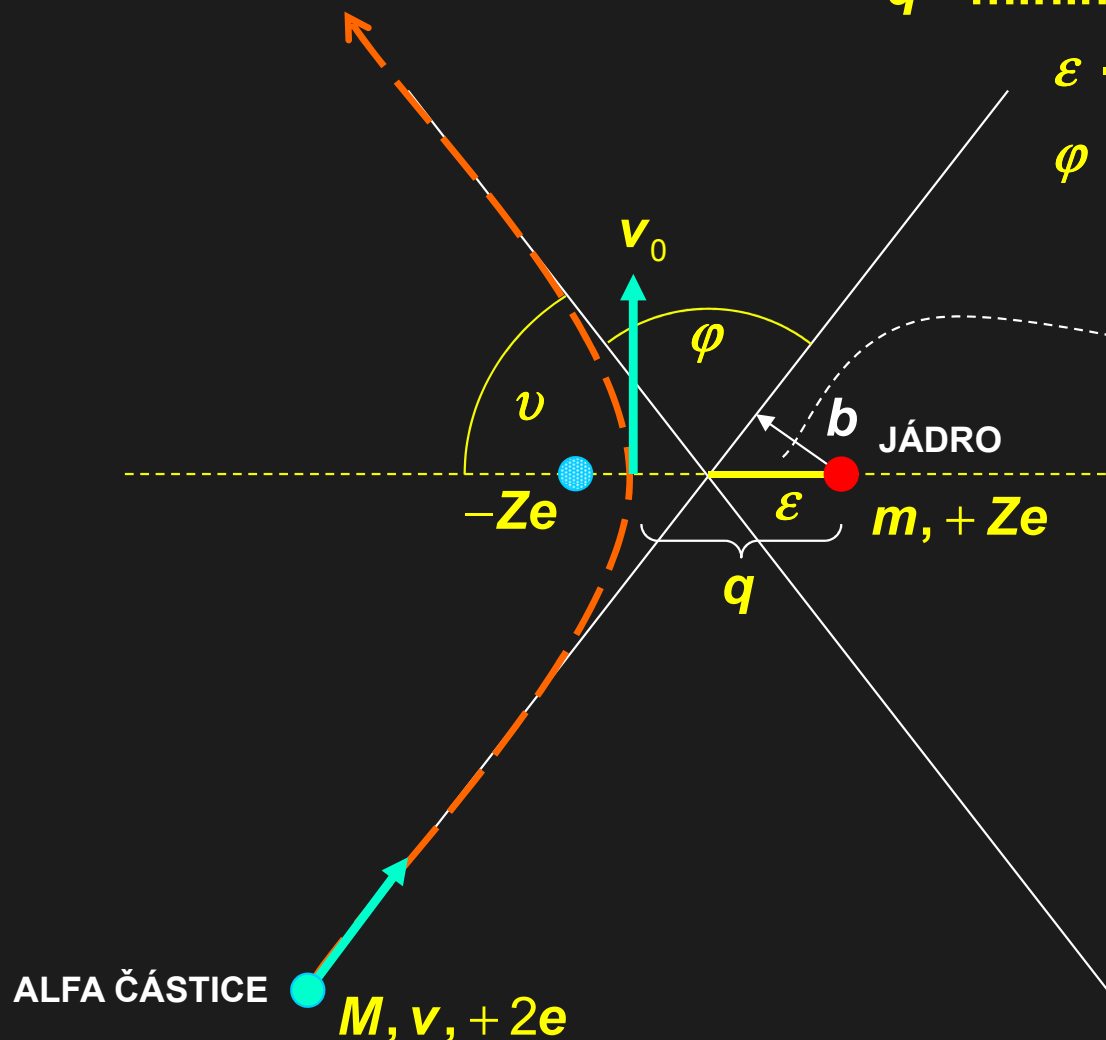


# Vysvětlení Rutherfordova experimentu

$q$  - minimální vzdálenost částice  $\alpha$  od jádra

$\varepsilon$  - excentricita hyperboly

$\varphi$  - úhel odchýlení  $\alpha$  částice



$$q = \varepsilon \cdot (1 + \cos \nu)$$

$$\sin \nu = \frac{b}{\varepsilon} \Rightarrow \varepsilon = \frac{b}{\sin \nu}$$

$$q = \frac{b}{\sin \nu} \cdot (1 + \cos \nu)$$

**zákon zachování energie**

$$\frac{1}{2} M v^2 = \frac{1}{2} M v_0^2 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{2Ze^2}{q}$$

$$1 = \frac{v_0^2}{v^2} + \frac{4Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 M v^2} \cdot \frac{\sin \nu}{b(1 + \cos \nu)}$$

při označení  $k = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 M v^2}$

$$1 = \frac{v_0^2}{v^2} + \frac{2k}{b} \cdot \frac{\sin \nu}{(1 + \cos \nu)}$$



# Vysvětlení Rutherfordova experimentu

Zákon zachování momentu hybnosti:

$$Mvb = Mv_0q \Rightarrow \frac{v}{v_0} = \frac{b}{q} = \frac{\sin \nu}{1 + \cos \nu}$$

dosazením do posledního vztahu na předchozí straně:

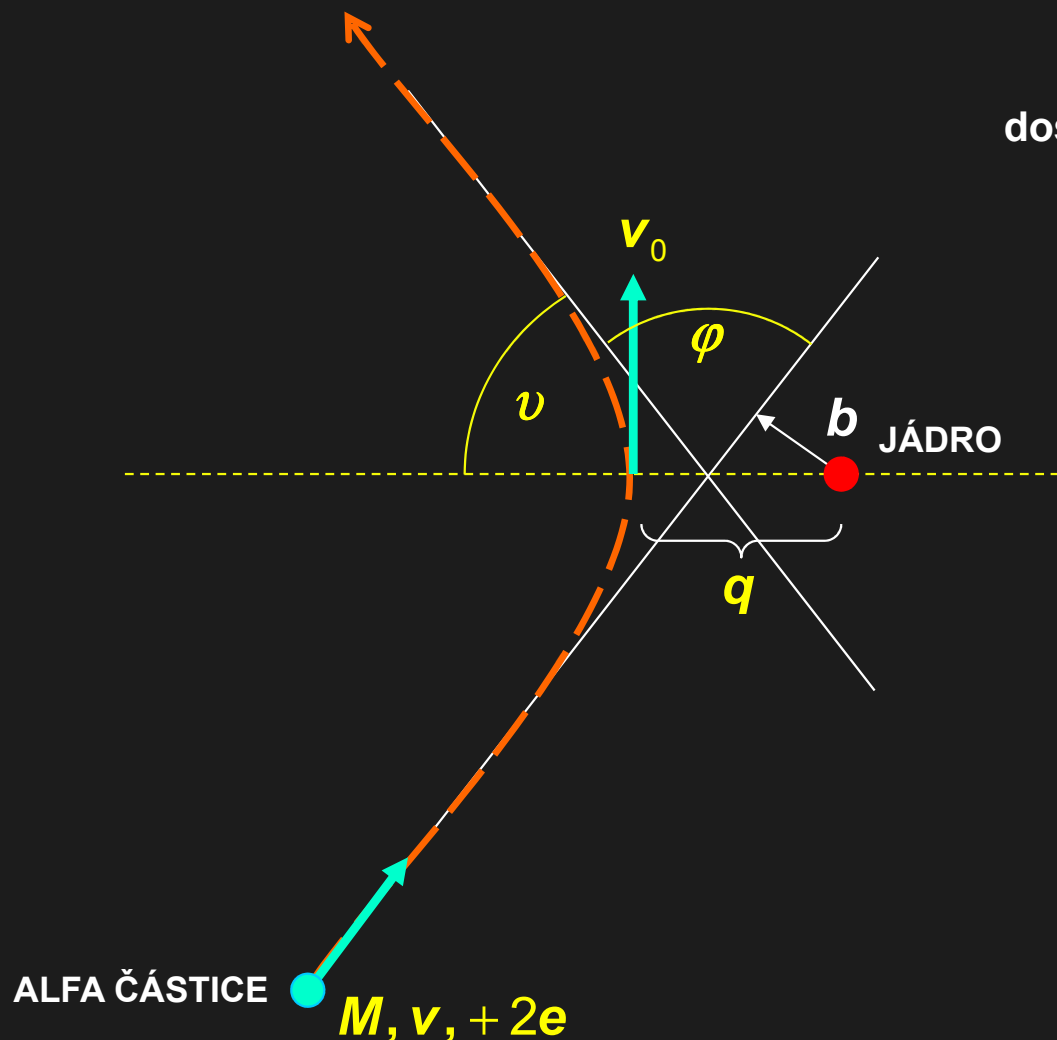
$$1 = \frac{\sin^2 \nu}{(1 + \cos \nu)^2} + \frac{2k}{b} \cdot \frac{\sin \nu}{(1 + \cos \nu)}$$

$$1 = \frac{1 - \cos^2 \nu}{(1 + \cos \nu)^2} + \frac{2k}{b} \cdot \frac{\sin \nu}{(1 + \cos \nu)}$$

$$1 = \frac{1 - \cos \nu}{1 + \cos \nu} + \frac{2k}{b} \cdot \frac{\sin \nu}{(1 + \cos \nu)}$$

$$1 + \cos \nu = 1 - \cos \nu + \frac{2k}{b} \cdot \sin \nu$$

$$2 \cos \nu = \frac{2k}{b} \cdot \sin \nu \Rightarrow \operatorname{tg} \nu = \frac{b}{k}$$

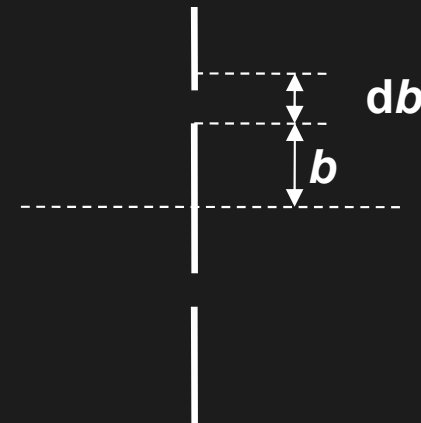
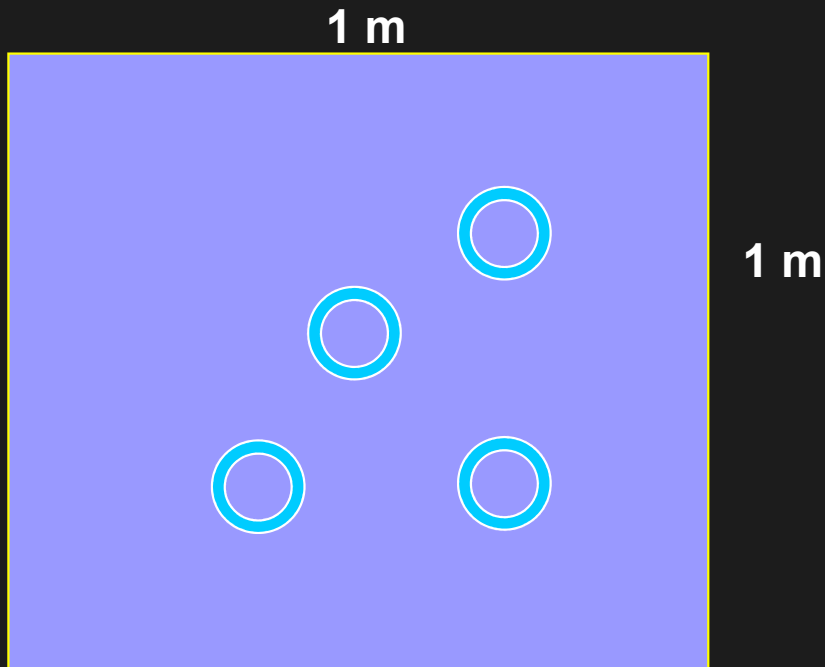


$$\phi = \pi - 2\nu, \quad \nu = \frac{\pi}{2} - \frac{\phi}{2} \Rightarrow \frac{b}{k} = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\phi}{2}\right)}{\cos\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\phi}{2}\right)} = \frac{\cos \frac{\phi}{2}}{\sin \frac{\phi}{2}} = \operatorname{cotg} \frac{\phi}{2}$$

## 1. 2. První modely atomu

# Vysvětlení Rutherfordova experimentu

Jaká je pravděpodobnost odchýlení částice alfa do úhlu  $(\varphi, \varphi + d\varphi)$



Odchýlení o úhly  $(\varphi, \varphi + d\varphi)$

odpovídá dopadu do mezikruží  $(b, b + db)$

plocha tohoto mezikruží  $2\pi b \cdot db$

celková plocha mezikruží  $P \cdot 2\pi b \cdot db$

kde  $P$  je počet atomů Au na ploše  $1 \text{ m}^2$ .

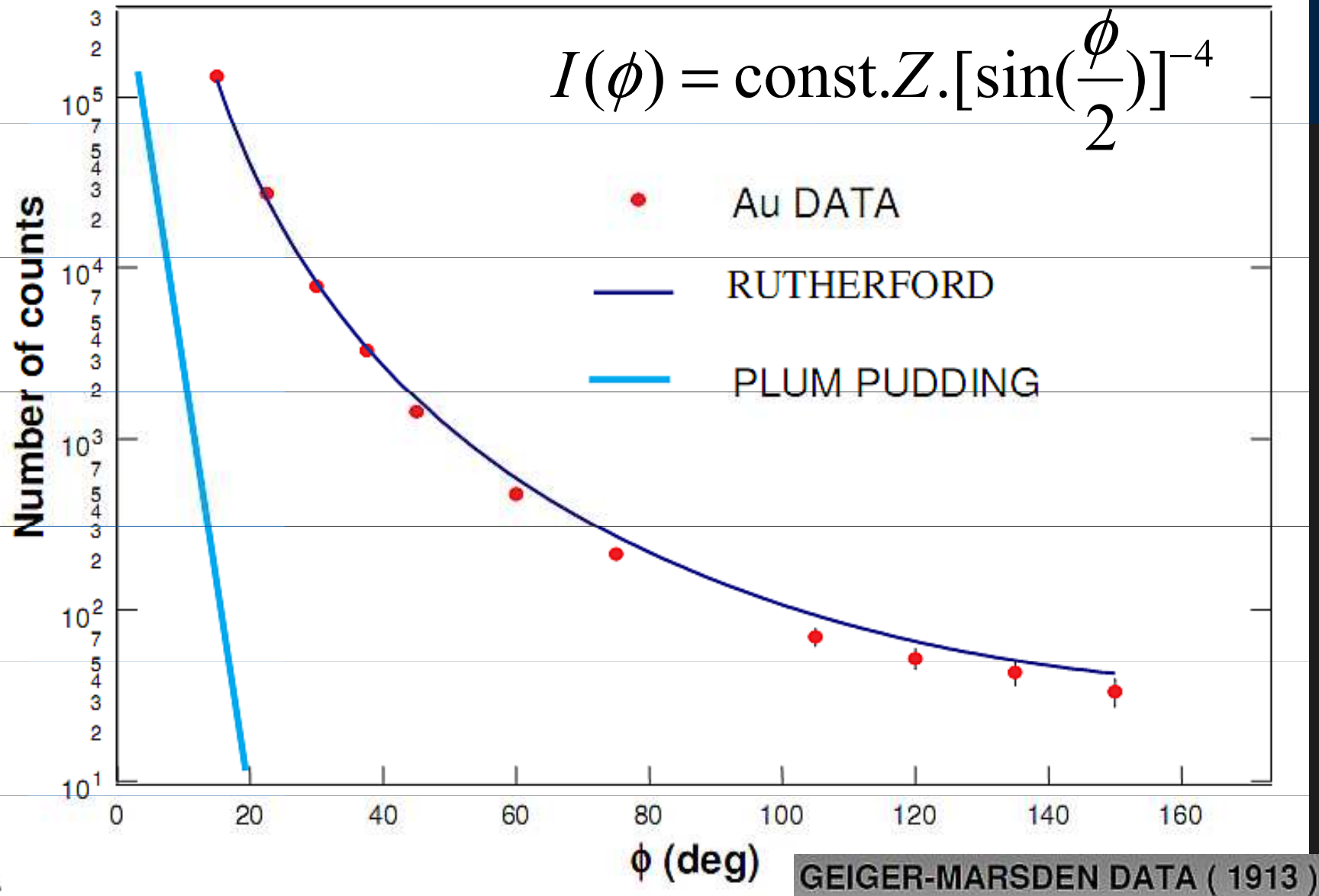
$$\frac{P \cdot 2\pi b \cdot db}{1}, \text{ protože } b = k \cdot \cotg \frac{\varphi}{2},$$

Pravděpodobnost odchýlení je dána

$$db = -\frac{k}{2} \cdot \frac{1}{\sin^2 \frac{\varphi}{2}} \cdot d\varphi,$$

$$dw = P \cdot \pi \left( \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 Mv^2} \right) \cdot \frac{\cos \frac{\varphi}{2}}{\sin^3 \frac{\varphi}{2}} \cdot d\varphi,$$

# Tok rozptýlených částic závisí na úhlu rozptylu ří jako



$$R \leq 2.9 \cdot 10^{-14} \text{ m}$$

## 1. 2. První modely atomu

# Rutherfordův model atomu (planetární)

z podobnosti Coulombova zákona a zákona gravitačního:

vyplývá, že atom se musí řídit Keplerovými zákony:

1. Elektrony se pohybují kolem jádra po elipsách, v jejichž společném ohnisku je jádro.
2. Průvodič elektronu opisuje ve stejných časových intervalech stejné plochy.
3. Platí  $\frac{T^2}{a^3} = \text{konst.}$  kde  $T$  je oběžná doba,  $a$  je velká poloosa eliptické dráhy

Velikost jádra lze odhadnout z minimální vzdálenosti mezi  $\alpha$ -částicí a jádrem, kterou částice dosáhne při  $f = p$ , vyjde řádově 10-15 m.

V době objevu nebylo jasné:

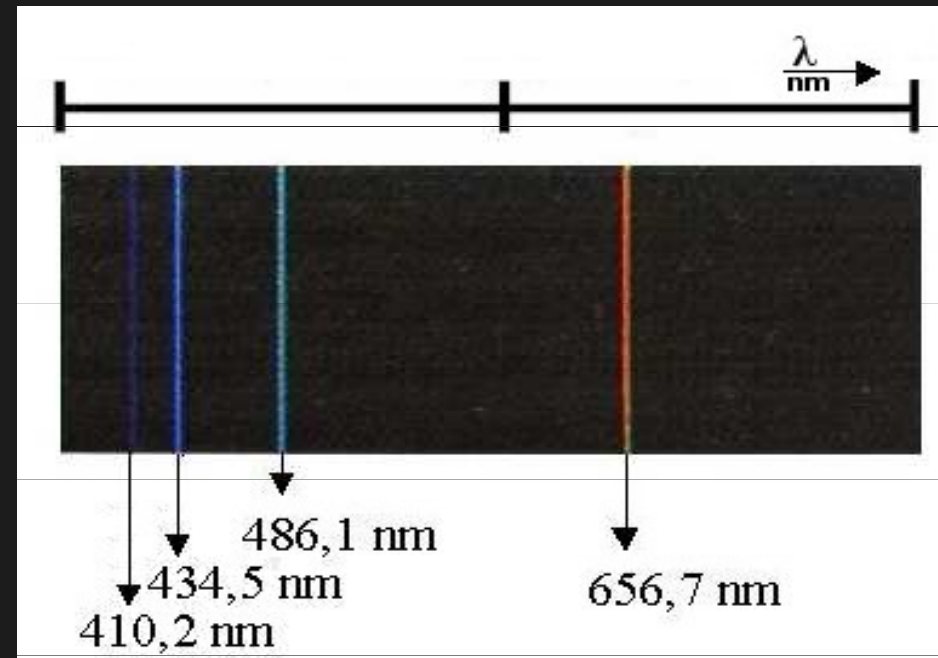
- (i) co drží protony v jádře a překonává odpudivé elektrostatické síly mezi protony
- (ii) proč je hmotnost atomu větší než hmotnost  $Z$  protonů
- (iii) proč se elektrony pohybují po stabilních drahách kolem jádra a nevyzařují při tomto pohybu elektromagnetické vlnění

Problém (i) byl vyřešen mnohem později objevem silné interakce.

Problém (ii) byl vyřešen objevem neutronu (J. Chadwick – 1921).

### 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

- elektron se pohybuje po kruhové dráze – podléhá zrychlení (dostředivému), podle klasické elektrodynamiky musí vyzařovat energii ve formě elektromagnetického záření
- pokud by elektron padal do jádra a v něm se energie obnovovala, muselo by mít emitované záření spojité spektrum – spor se skutečností: čárové spektrum
- atomy v základním stavu nezáří



## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 1. Záření absolutně černého tělesa

Kirchhoff:  $\frac{E_\nu}{A_\nu} = f(\nu, T)$ ,  $E_\nu$  spektrální zářivost tělesa

$A_\nu$  spektrální pohltivost tělesa,  $A_\nu = 1 \Rightarrow$  absolutně černé těleso



Kirchhoff, G.  
(Gustav), 1824 -  
1887



Wilhelm *Karl Werner* Wien  
(13.01.1864-30.08.1928)



John William Strutt alias Lord Rayleigh  
(12.11.1842-1919)

# 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

## 1. 3. 1. Záření absolutně černého tělesa

Rayleigh-Jeans:

$$f(\lambda, T) \cdot d\lambda = \frac{2\pi k T c}{\lambda^4} \cdot d\lambda$$

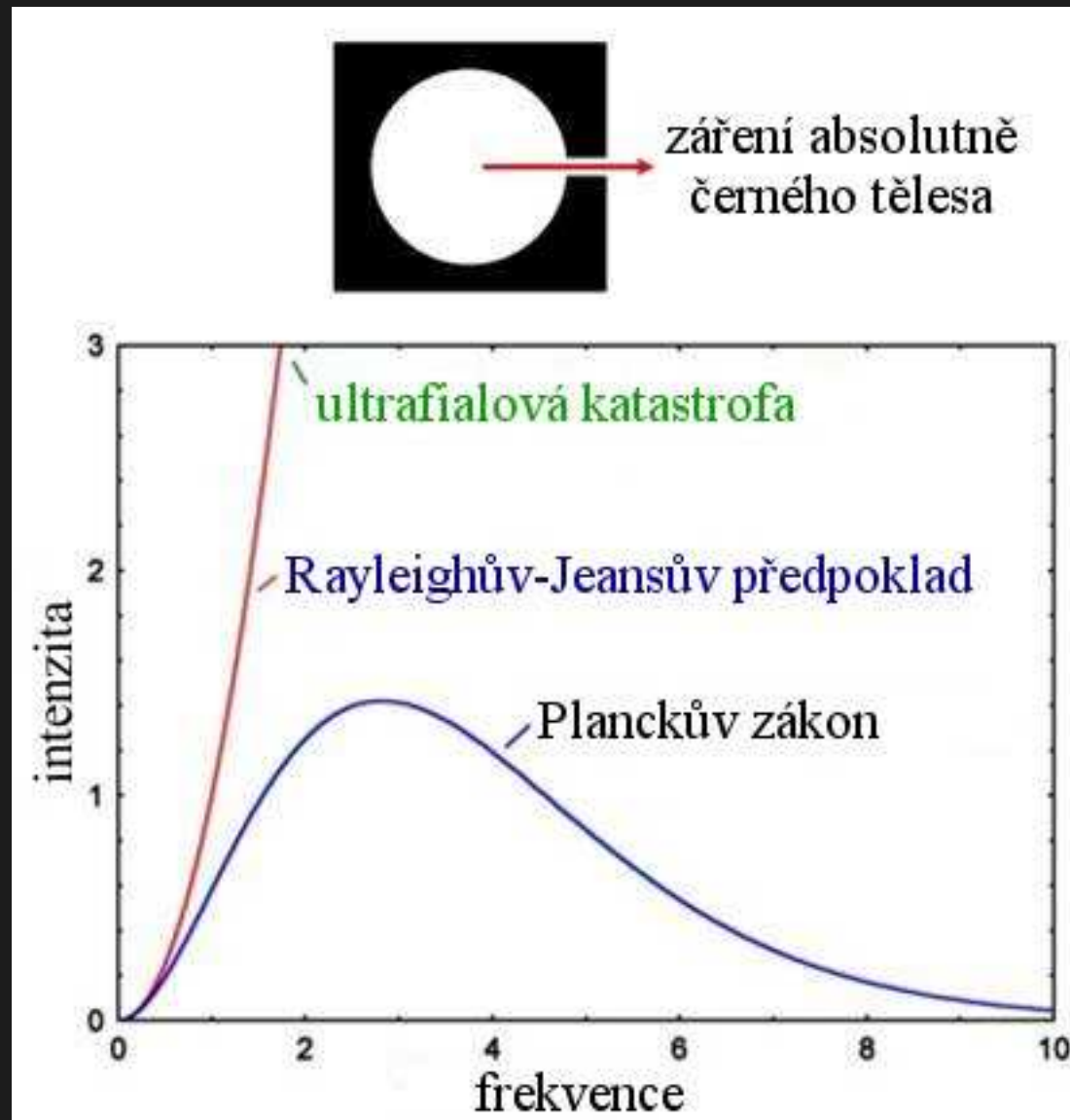
$$f(\nu, T) \cdot d\nu = -\frac{2\pi k T}{c^2} \cdot \nu^2 \cdot d\nu$$

$$\int_0^{\infty} f(\nu, T) \cdot d\nu = -\frac{2\pi k T}{c^2} \cdot \int_0^{\infty} \nu^2 \cdot d\nu \rightarrow \infty$$

**ultrafialová katastrofa**



James Jeans (1877-1946)



## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 1. Záření absolutně černého tělesa

Max Planck (1900): střední energie "oscilací" není  $kT$ , ale  $\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$

$$\Rightarrow f(\nu, T) \cdot d\nu = \frac{2\pi h}{c^2} \cdot \frac{\nu^3 \cdot d\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

kvantová emise: energie se z atomů vyzařuje jen ve formě oddělených porcí – *kvant* – energie

kvantum energie má velikost

$$h\nu$$

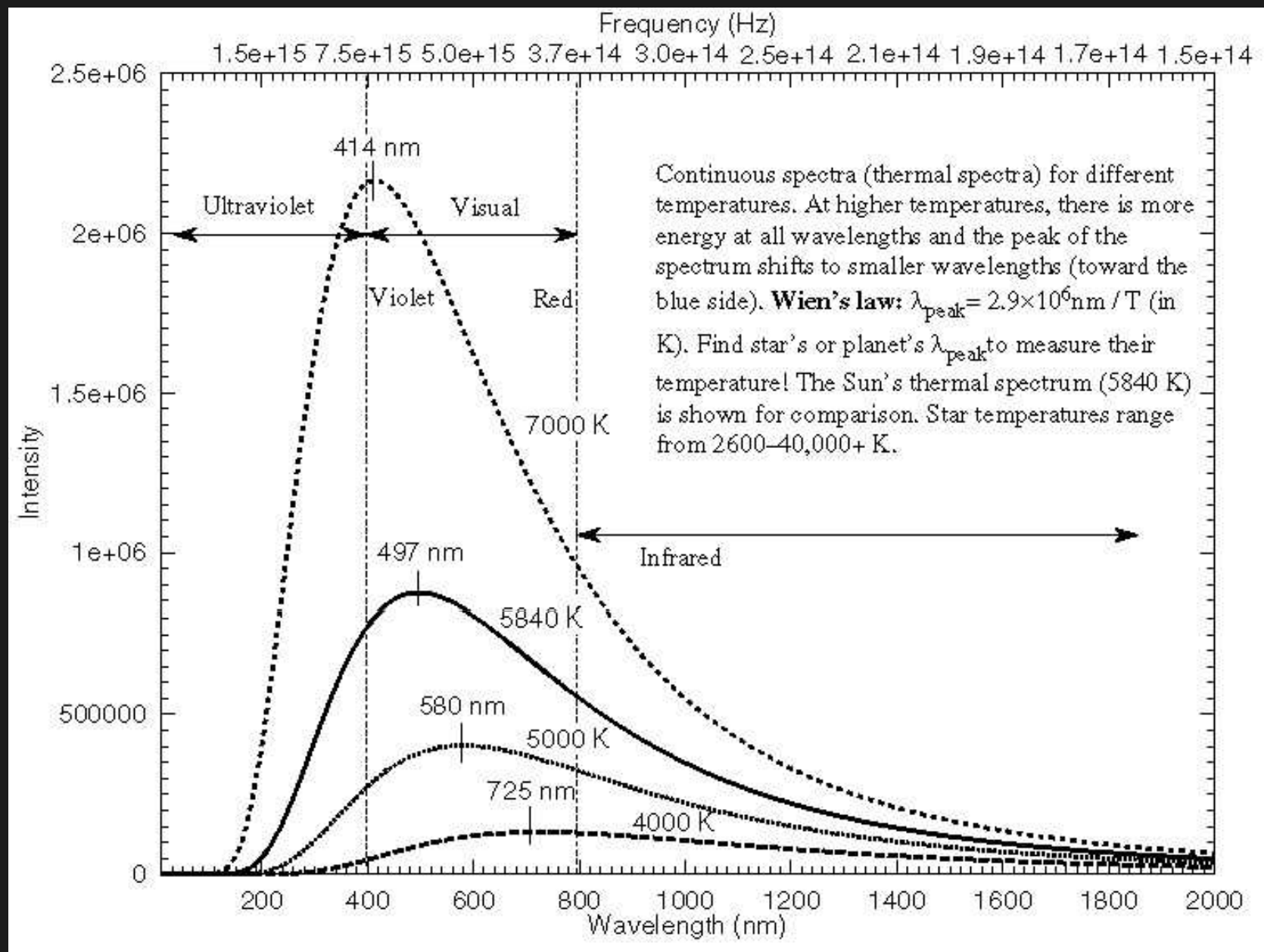


Max Karl Ernst Ludwig Planck  
(23.04.1858-04.10.1947)



# 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

## 1. 3. 1. Záření absolutně černého tělesa



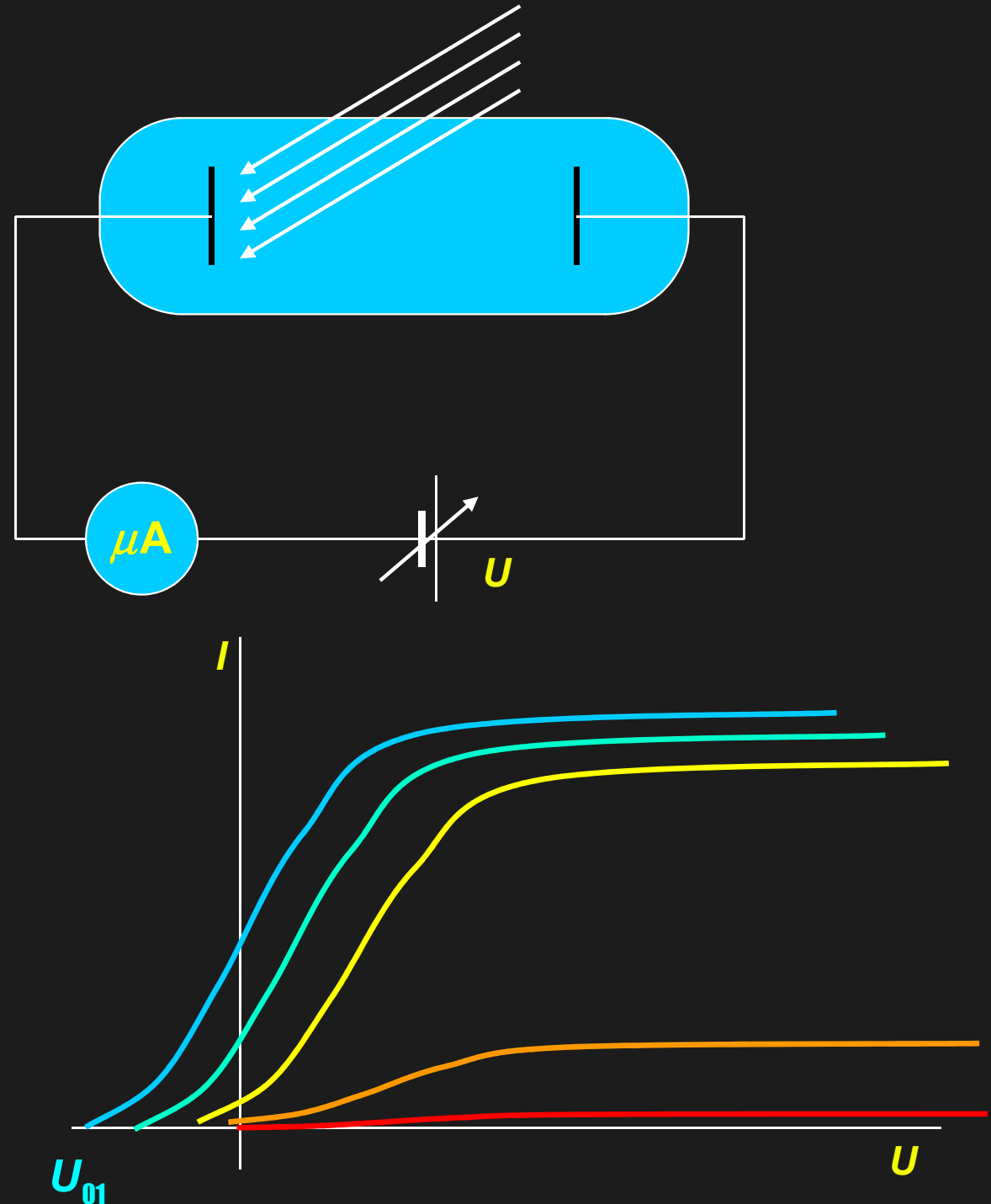
## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 2. Fotoelektrický jev



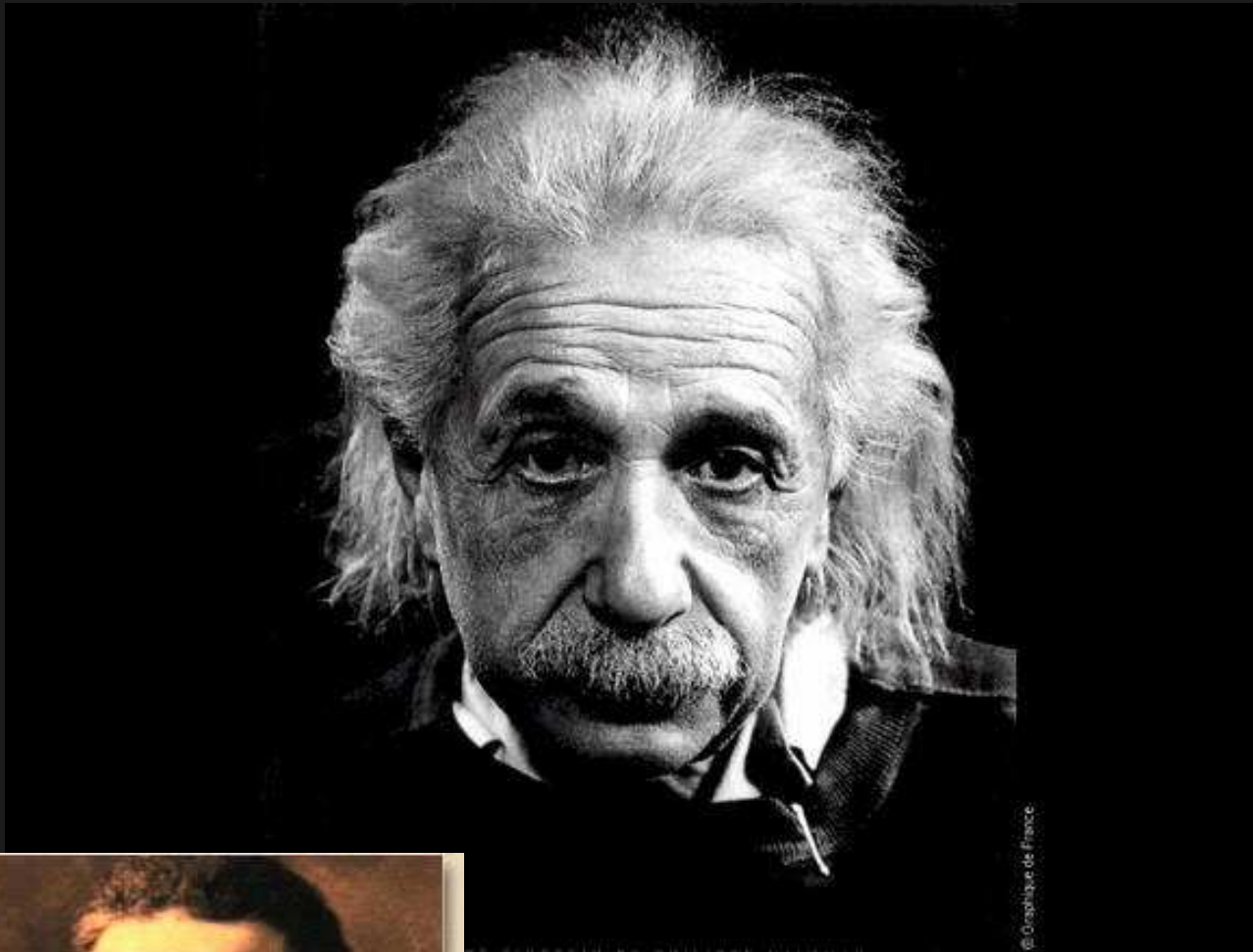
Philipp Lenard (1862–1947 )

1898 Lenard a Thomson: při fotoelektrickém jevu jsou uvolňovány elektrony, jejich energie jsou úměrné frekvenci, ne intenzitě světla (jak odpovídalo klasické elektrodynamice)



## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 2. Fotoelektrický jev



Albert Einstein (1879–1955)

1905 Einstein: světlo je v kvantech nejen uvolňováno, ale i absorbováno

$$h\nu = A + W_k$$

Energie kvanta se zčásti spotřebuje na výstupní práci elektronu z kovu ( $A$ ), zbytek je kinetickou energií emitovaného elektronu.

Nobelova cena 1921

$$h\nu_{\min} = A \Rightarrow \nu_{\min} = \frac{A}{h}$$

kov	$A / \text{eV}$	kov	$A / \text{eV}$
Cs	1,81	Rb	2,16
K	2,22	Na	2,35
Pt	5,32		

## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 2. Fotoelektrický jev

1905 Einstein: je-li světlo v kvantech uvolňováno i absorbováno, lze předpokládat, že se v kvantech i šíří: zavedení částice foton

foton má energii:  $h\nu$

foton má klidovou hmotnost nulovou, protože se šíří rychlostí  $c$

foton má hmotnost:  $mc^2 = h\nu \Rightarrow m = \frac{h\nu}{c^2}$

foton má hybnost:  $p = mc = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 3. Comptonův jev (rozptyl)

1922 Compton: dopadá-li na hmotu monoenergetické rentgenové záření, rozptyluje se. Rozptýlené záření má přitom větší vlnovou délku než záření dopadající. Úhel, o který se rentgenové záření rozptýlí, souvisí jednoznačně se vzrůstem vlnové délky.

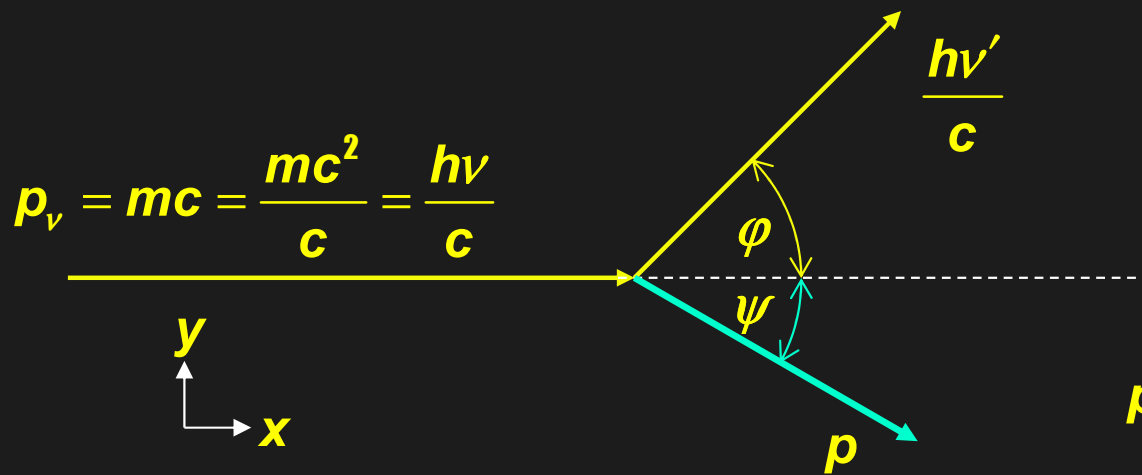
Význam děje: konečné potvrzení fotonu. Celý děj lze vysvětlit jako pružnou srážku fotonu a elektronu



Arhtur Holly Compton (1892-1962)

# 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

## 1. 3. 3. Comptonův jev (rozptyl)



Zákony zachování hybnosti:

$$\mathbf{0} = \frac{hv'}{c} \cdot \sin \varphi - p \cdot \sin \psi$$
$$\frac{hv}{c} = \frac{hv'}{c} \cdot \cos \varphi + p \cdot \cos \psi$$

po umocnění a sečtení:

$$p^2 = \left(\frac{hv}{c}\right)^2 + \left(\frac{hv'}{c}\right)^2 - 2\frac{h^2vv'}{c^2} \cdot \cos \varphi$$

stejnou veličinu vypočítáme ze zákona zachování energie:

$$hv + m_0c^2 = hv' + mc^2 \Rightarrow m = m_0 + \frac{h}{c^2}(v - v')$$

z relativistického vztahu pro hmotnost určíme rychlost:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \Rightarrow v^2 = c^2 \left(1 - \frac{m_0^2}{m^2}\right) \quad p^2 = m^2v^2 = m^2 \cdot c^2 \left(1 - \frac{m_0^2}{m^2}\right) = c^2(m^2 - m_0^2)$$

$$p^2 = c^2 \left[ \frac{h^2}{c^4} \cdot (v - v')^2 + \frac{2m_0h}{c^2} (v - v') \right]$$

## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 3. Comptonův jev (rozptyl)

porovnání pravých stran podtržených rovnic:

$$\frac{h^2}{c^2} \cdot (\nu - \nu')^2 + 2m_0 h (\nu - \nu') = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\frac{h^2\nu\nu'}{c^2} \cdot \cos \varphi$$

$$(\nu - \nu')^2 + \frac{2m_0 c^2}{h} (\nu - \nu') = \nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cdot \cos \varphi$$

$$-2\nu\nu' + \frac{2m_0 c^2}{h} (\nu - \nu') = -2\nu\nu' \cdot \cos \varphi$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda}, \nu' = \frac{c}{\lambda'} \Rightarrow -2\frac{c^2}{\lambda\lambda'} + \frac{2m_0 c^3}{h} \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = -2\frac{c^2}{\lambda\lambda'} \cdot \cos \varphi$$

$$-1 + \frac{m_0 c}{h} (\lambda' - \lambda) = -\cos \varphi$$

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \varphi)$$

$$1 - \cos 2\frac{\varphi}{2} = 1 - \left(\cos^2 \frac{\varphi}{2} - \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right) = 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}$$

$$\lambda' - \lambda = \frac{2h}{m_0 c} \sin^2 \frac{\varphi}{2}$$

$$\frac{h}{m_0 c}$$

Comptonova vlnová délka elektronu

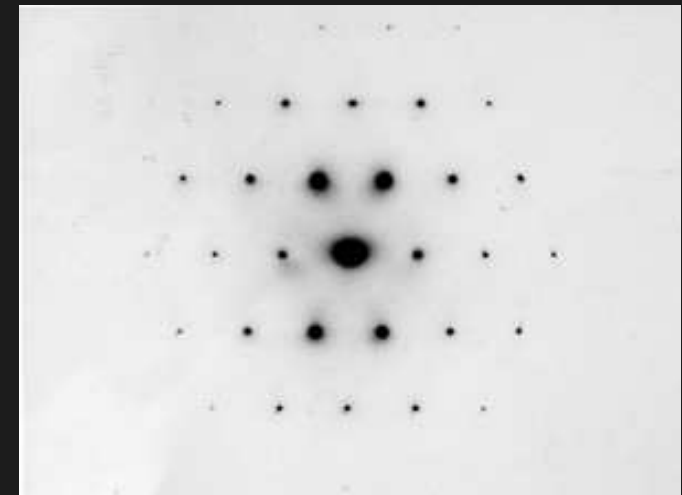
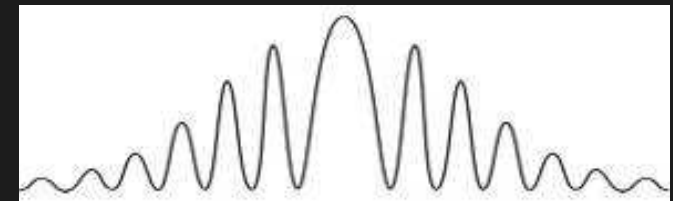
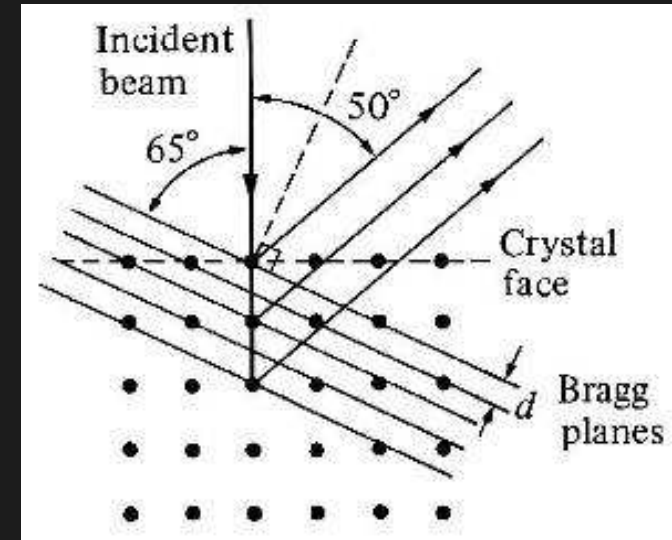
## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 4. Vlnové vlastnosti částic

1927 Davisson, Germer: interference elektronů po odrazu na krystalových rovinách se řídí stejným zákonem, jako při pokusu s rentgenovým zářením



Clinton Davisson (1881-1958),  
Lester Germer (1896-1971)

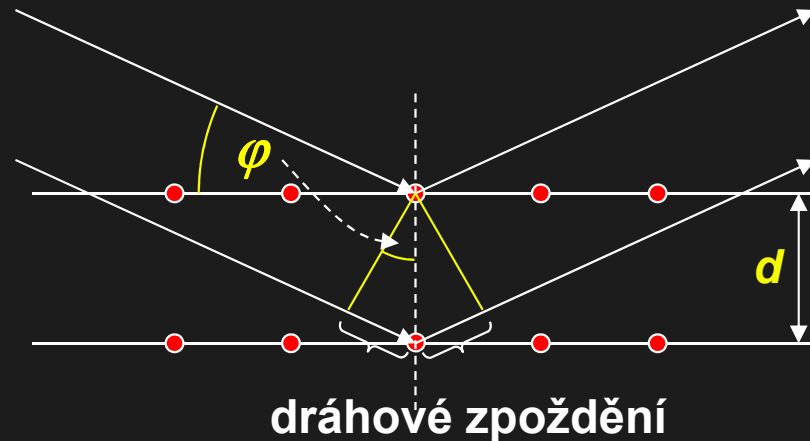




## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 4. Vlnové vlastnosti částic

Vulfova-Braggova podmínka pro maximum interference s rentgenovým zářením:



$$n\lambda = 2d \sin \varphi \quad n \text{ pořadí maxima}$$

měření spekter:

- otáčení krystalu při konstantní energii elektronu
- změna energie elektronu při konstantním úhlu

zavedení vlnové délky pro částice:

$$E = h\nu = h \frac{v}{\lambda} \Rightarrow$$

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$



Louis Victor Pierre Raymond duc de Broglie (1892-1987)

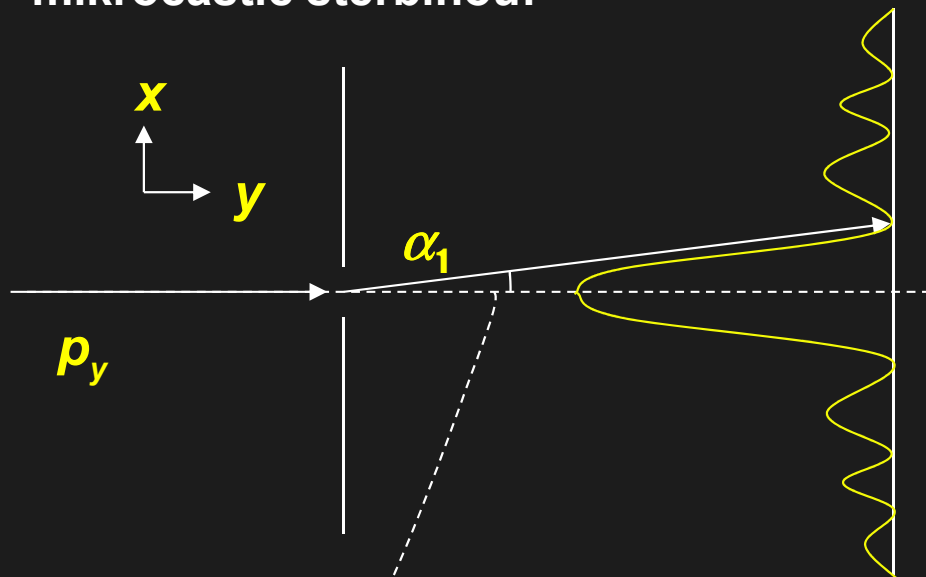
de Broglieova vlnová délka částice

**dualismus vlna- částice**

# 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

## 1. 3. 5. Ohyb mikročastic na štěrbíně

stejnou ekvivalenci jako při odrazu na krystalu můžeme nalézt i při průchodu mikročastic štěrbínou:



$$\delta p_x = p \sin \alpha_1$$

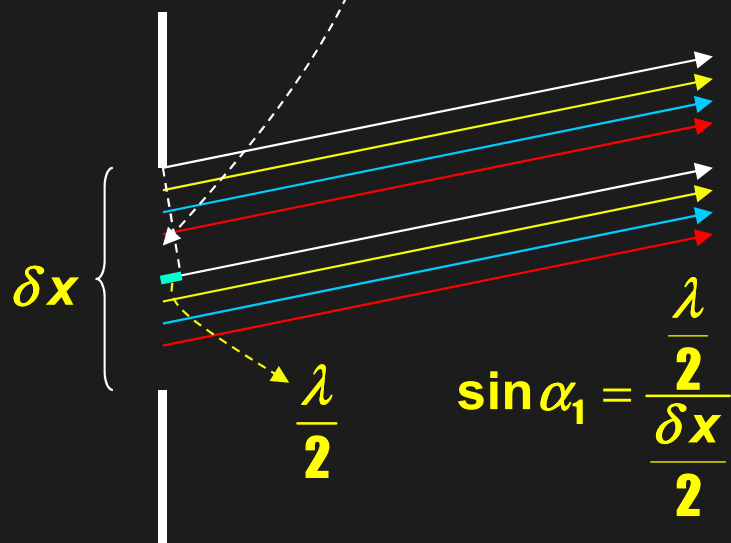
$$\frac{\delta p_x}{p} = \frac{\lambda}{\delta x} \Rightarrow \delta p_x \cdot \delta x = \lambda \cdot p$$
$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

$$\delta p_x \cdot \delta x = h$$

zavedeme-li střední kvadratické odchylky:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

1. Heisenbergova relace neurčitosti



## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 5. Ohyb mikročástic na štěrbině



$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \Delta E = \frac{\partial E}{\partial p} \cdot \Delta p = \frac{p}{m} \cdot \Delta p$$

$$\Delta E = \frac{p}{m} \cdot \Delta p = m \cdot \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{1}{m} \cdot \Delta p$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Werner Heisenberg (1901-1976)

## 2. Heisenbergova relace neurčitosti



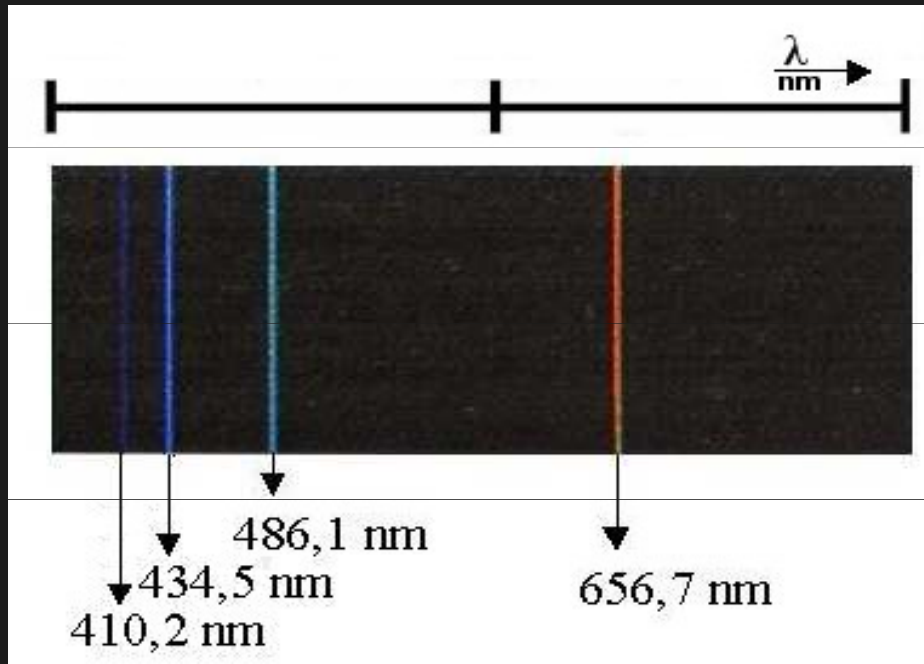
příklady:

dvojí filosofický výklad

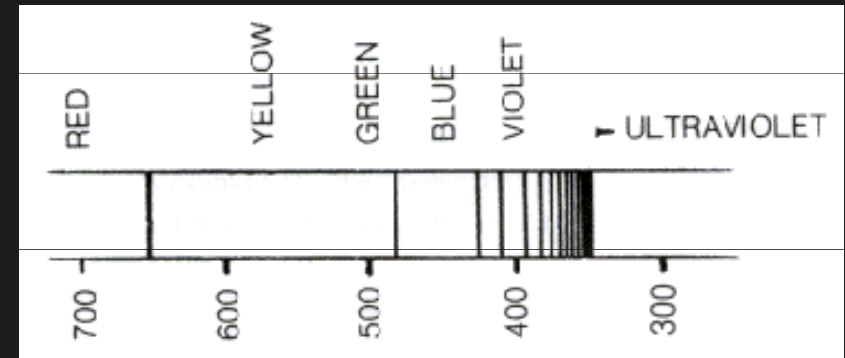
důsledky a projevy

# 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

## 1. 3. 6. Zákonitosti spektra atomu vodíku



1885: ve viditelné oblasti spektra 4 čáry  
později: v ultrafialové oblasti další čáry, které se zhušťují až k hraně série



Johann Jacob Balmer  
(1825-1898)



P. A. (Per Axel) Rydberg (1860-1931)  
upravil vztah na:

$$\lambda_H = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad n = 3, 4, 5, 6, \dots$$

$$\sigma_n = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \sigma_n = \frac{1}{\lambda_n} \text{ je vlnočet}$$

$R_H = 1,0967758 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  je Rydbergův vlnočet

## 1. 3. Poznatky a experimenty popírající klasickou mechaniku a elektrodynamiku

### 1. 3. 6. Zákonitosti spektra atomu vodíku

další zkoumání spektra v ultrafialové a infračervené oblasti:

$k = 1$  : Lymanova série UV

$k = 2$  : Balmerova série viditelné + UV

$k = 3$  : Paschenova série IR

$k = 4$  : Brackettova série IR

$k = 5$  : Pfundova série IR

$k = 6$  : Humphreyova série IR

$$\sigma_{kn} = R_H \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n > k$$

potvrzení Ritzova kombinačního principu:  
Vlnčet jakékoli spektrální čáry vodíku lze vyjádřit rozdílem vlnčetů jiných dvou čar.

term:  $T_n = \frac{R_H}{n^2} \Rightarrow \sigma_{kn} = T_k - T_n$

$$\sigma_{kn} = \sigma_{kj} - \sigma_{jn}$$

# 1. 4. Bohrov model atomu

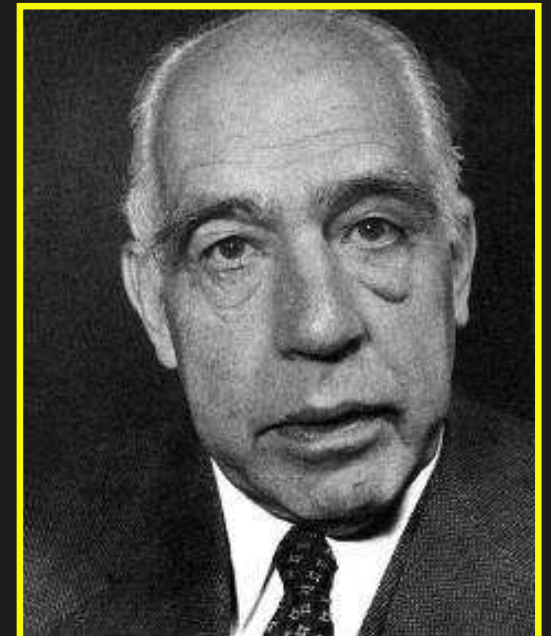
1913: 3 postuláty popírající částečně klasickou mechaniku a klasickou elektrodynamiku:

- I. Elektron může trvale kroužit kolem jádra atomu jen v takových kruhových drahách (kvantových), pro které  $2\pi$  násobek momentu hybnosti elektronu vzhledem k jádru je celistvým násobkem Planckovy konstanty
- II. Pokud elektron obíhá v některé z kvantových drah, atom nezáří, jeho energie je stálá.
- III. Při přechodu elektronu na jinou kvantovou dráhu se vyzáří nebo pohltí foton, jehož energie je rovna změně energie elektronu:

$2\pi mrv = nh$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  je hlavní kvantové číslo

$$h\nu_{nm} = E_n - E_k$$

Niels Henrik David Bohr  
(1885-1962)



## 1. 4. Bohrův model atomu

klasickými postupy je možné vypočítat poloměr kruhové dráhy, rychlost elektronu a jeho energii:

$$2\pi mrv = nh, \quad \text{podmínka kruhové dráhy:} \quad \frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \Rightarrow r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 mv^2}$$

Z je protonové číslo (pořadí v periodické soustavě)

$$v_n = \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 h} \cdot \frac{1}{n} \Rightarrow r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m Ze^2} \cdot n^2 \quad r_1 = a_0 = 5,29167 \cdot 10^{-11} \text{ m je Bohrův poloměr}$$

$$E_n = T_n + W_p = \frac{1}{2} mv_n^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = \frac{mZ^2 e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} - \frac{mZ^2 e^4}{4\epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

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

$$h\nu_{nm} = E_n - E_k \Rightarrow h \frac{c}{\lambda_{nm}} = E_n - E_k \Rightarrow \sigma_{nm} = \frac{mZ^2 e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

porovnáním s Balmerovým vztahem  $\sigma_{nm} = R_H \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$

dostáváme pro  $Z = 1$  Rydbergův vlnčet:  $R_H = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$

## 1. 4. Bohrov model atomu

později zpřesnění – vliv pohybu jádra – vedlo k náhradě:

$$m \rightarrow \mu \quad \text{redukovaná hmotnost elektronu:} \quad \mu = \frac{Mm_0}{M + m_0}$$

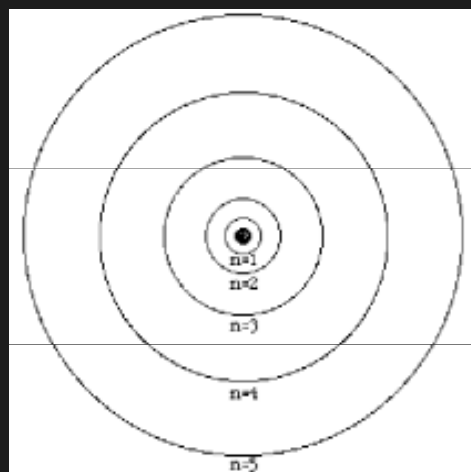
pak je možné pro  $M \rightarrow \infty$  : Rydbergova konstanta  $R = \frac{m_0 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} = 1,0937309 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$

souhlas byl tak obrovský, že v roce 1932 Urey, Brickvedde a Murphy, když zjistili, že spektrální čáry vodíku jsou doprovázeny velmi blízkými slabými čarami s nepatrně vyšším vlnočtem, tak, jako by  $M$  bylo dvojnásobné, objevili první izotop vodíku:  
**deutérium**

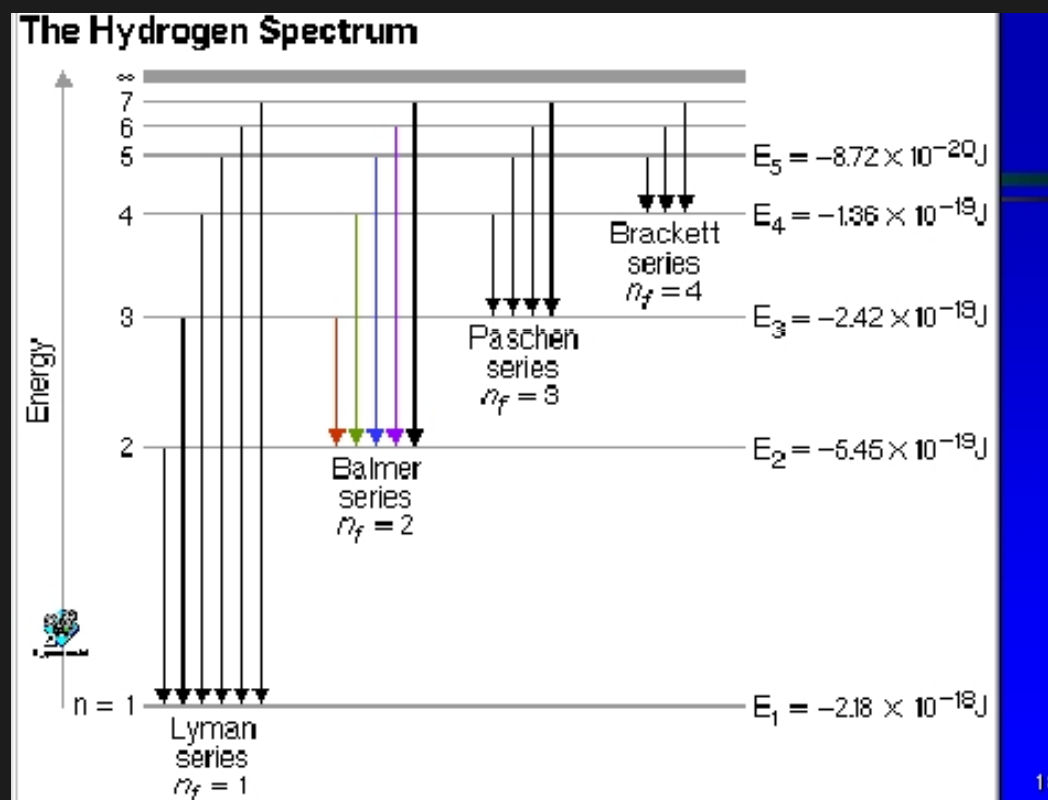


# 1. 4. Bohrův model atomu

Bohrovy představy:



Grotrianův diagram:



## 1. 4. Bohrův model atomu

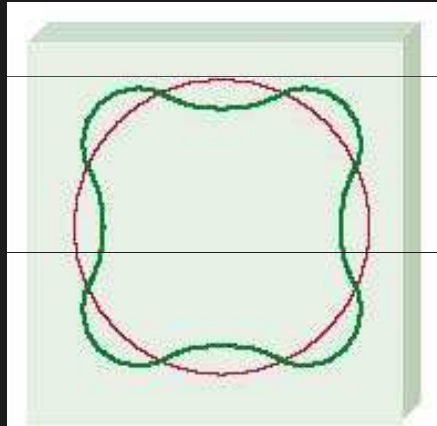
Častá interpretace 1. Bohrova postulátu:

$2\pi mrv = nh$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  je hlavní kvantové číslo

$\lambda = \frac{h}{mv}$  de Broglieova vlnová délka částice

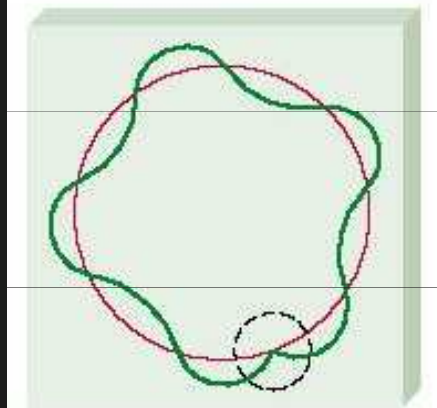
$$2\pi r_n = n\lambda$$

přípustné dráhy jsou pouze ty, kde délka kruhové dráhy je celistvým násobkem de Broglieovy vlnové délky elektronu



(a)

povolená (kvantová) dráha pro  $n = 4$

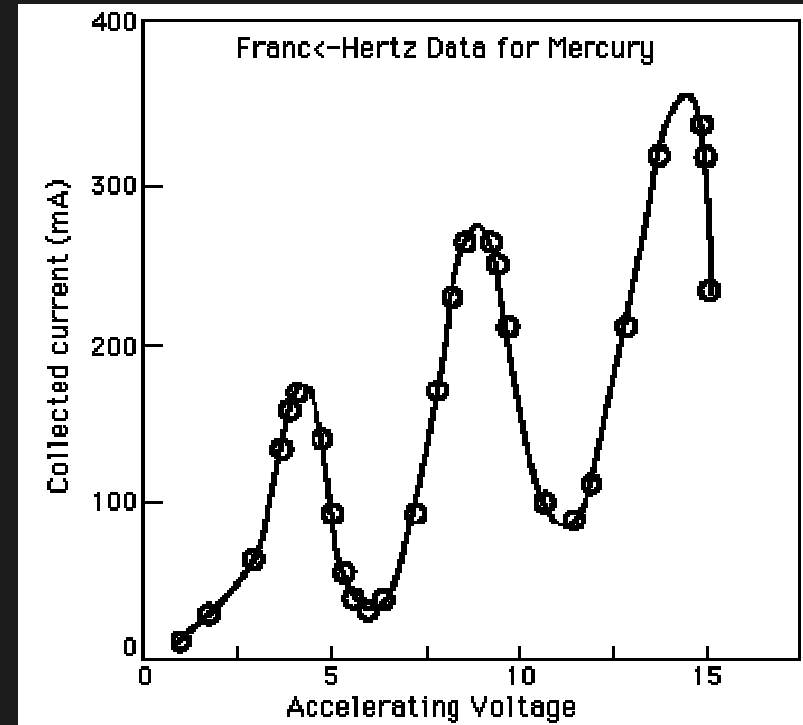
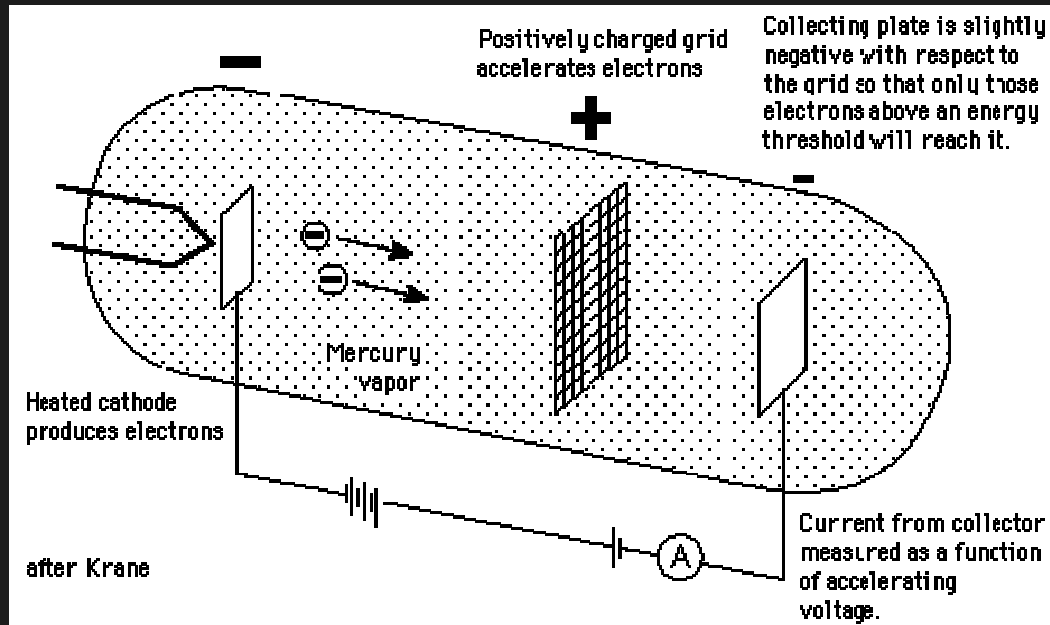


(b)

nepovolená dráha

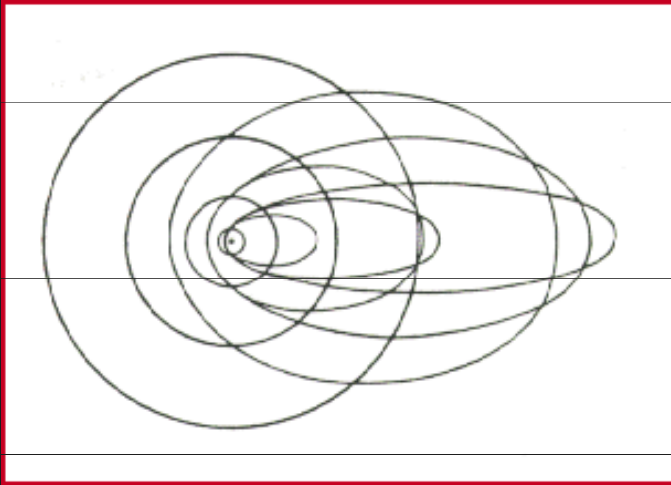
## 1. 4. Bohrův model atomu

Důležitý experiment potvrzující hladinové uspořádání kvantovaných energií v elektronů v atomech: Franckův-Hertzův pokus – 1914 (James Franck, Gustav Hertz, Nobelova cena 1925)

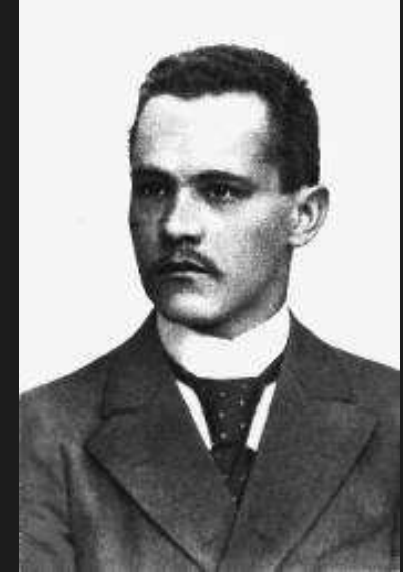
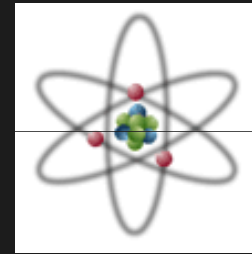


# 1. 5. Nedostatky Bohrova modelu atomu

1915 – Sommerfeld: spektrální čáry mají *jemnou strukturu*: každá čára se skládá z několika velmi blízkých čar. Domníval se, že je to způsobeno tím, že kromě povolených kruhových drah jsou možné i eliptické dráhy s různou excentricitou



Arnold Sommerfeld  
(1868-1951)



Bohrův model je směsí klasických představ a postulátů, které jsou s klasickými představami ve sporu

Bohrův model nedokáže vysvětlit spektra jiných atomů než H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>, Be<sup>3+</sup>, B<sup>4+</sup>, ..., takzvaných **izoelektronových atomů**

Bohrův model nedokáže

- vysvětlit existenci molekuly H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, ...
- zdůvodnit jevy, nastávající v atomech, které jsou ve vnějším elektromagnetickém poli
- vysvětlit různé intenzity spektrálních čar

# 1. 6. Základní představy, ze kterých vznikla kvantová mechanika

částice má vlnové vlastnosti = měla by být popsatelná stejně jako vlnění:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{i\omega t} \quad \text{popis stacionárního vlnění} \quad \omega = 2\pi f = 2\pi \frac{v}{\lambda}$$

prostorová závislost

periodická časová závislost

funkce musí vyhovovat vlnové rovnici:

$$\Delta\Psi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}$$

po dosazení:  $e^{i\omega t} \Delta\psi = \frac{1}{v^2} \psi(-\omega^2) \cdot e^{i\omega t}$

$$\Delta\psi + \frac{\omega^2}{v^2} \psi = 0 \quad \frac{\omega}{v} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{\frac{h}{p}} = \frac{2\pi mv}{h}$$

$$\Delta\psi + \frac{4\pi^2 m^2 v^2}{h^2} \psi = 0$$

de Broglieova vlnová délka

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{1}{2} m v^2 \right) \psi = 0$$

$$W_{kin} = E - U$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U\psi = E\psi$$

Schrödingerova rovnice

$\hat{H}\psi = E\psi$ ,  $\hat{H}$  je Hamiltonův operátor, operátor celkové energie

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 1. Vlnová funkce

postulát: Časový vývoj stavu soustavy dokonale popisuje vlnová funkce

$n$  částic:  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_n, t)$   $\Psi$  je bez přímého fyzikálního významu, zpravidla je komplexní

$\Psi$  je řešením časové Schrödingerovy rovnice:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

$\hat{H}$  je Hamiltonův operátor (celkové energie)

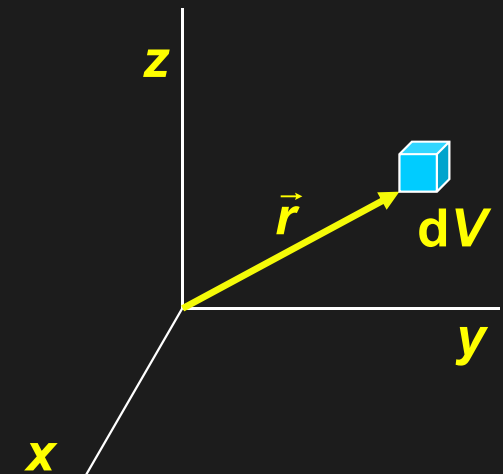
$\Psi$  určuje stav jednoznačně, tj. lze z ní matematickými postupy získat veškeré dostupné informace o soustavě

$\Psi \cdot \Psi^* = |\Psi|^2 = \rho$  je hustota pravděpodobnosti výskytu

$\rho \cdot dV$  je pro  $n = 1$  pravděpodobnost toho, že v čase  $t$  je částice v objemu  $dV$  v místě popsaném průvodičem

$\int |\Psi|^2 \cdot dV = 1$  (integrace přes celý prostor)

normovací podmínka



## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 1. Vlnová funkce

při stacionárních dějích (silové pole je časově nezávislé), platí:

$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{i\omega t}$  kde  $\psi$  je řešením tzv. bezčasové Schrödingerovy rovnice:

$\hat{H}\psi = E\psi$ ,  $\hat{H}$  je Hamiltonův operátor, operátor celkové energie

pro jednu částici má Hamiltonův operátor tvar:  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$ .

každá vlnová funkce musí mít 4 následující vlastnosti:

- jednoznačná
- spojitá
- konečná
- kvadraticky integrabilní

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 1. Vlnová funkce

hlavní rozdíly mezi kvantovou a klasickou mechanikou:





## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 2. Hodnoty fyzikálních veličin

Každé fyzikální veličině je v kvantové mechanice přiřazen operátor (postulát) dva operátory jsou postulovány: operátor souřadnice:  $\hat{x} = x$ .

a operátor složky hybnosti:  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Operátory ostatních fyzikálních veličin se získávají tak, že se do klasického definičního vztahu dosadí postulované operátory. Příklad: operátor celkové energie

$$E = T + U = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + U \Rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right] + U = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U$$

Hodnoty, kterých může nabývat fyzikální veličina  $D$  reprezentovaná operátorem  $\hat{D}$  jsou charakteristickými hodnotami tohoto operátoru, získané řešením charakteristické rovnice:

$$\hat{D}f = \mathcal{D}f$$

$f$  jsou charakteristické funkce, které slouží k výpočtu pravděpodobnosti příslušné hodnoty v daném stavu, musí být **jednoznačné** a **kvadraticky integrovatelné**

množina všech charakteristických hodnot se nazývá spektrum veličiny  $D$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 2. Hodnoty fyzikálních veličin

Spektrum může být: **spojité** (hybnost, souřadnice, čas, elektrický proud, ...)  
**diskrétní** (moment hybnosti, elektrický náboj, ...)

Je-li  $f_i$  charakteristická funkce příslušná charakteristické hodnotě  $\mathcal{D}_i$ , je pravděpodobnost této hodnoty dána vztahem:

$$\sigma_i = \left| \int f_i^* \psi d\tau \right|^2$$

kde  $f_i^*$  je komplexně sdružená funkce k  $f_i$ ,  $\psi$  je vlnová funkce popisující daný stav,  $d\tau$  je element všech proměnných, integruje se přes celý uvažovaný objem a symbol  $| \quad |$  značí modul komplexního čísla

Příklad: nalezení všech možných hodnot složky momenty hybnosti:  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

$$-i\hbar \frac{\partial f}{\partial \varphi} = \mathcal{L}_z f \quad \frac{df}{f} = \frac{\mathcal{L}_z}{-i\hbar} d\varphi \quad \frac{df}{f} = i \cdot \frac{\mathcal{L}_z}{\hbar} d\varphi \quad \ln f = i \cdot \frac{\mathcal{L}_z}{\hbar} \varphi + C \quad f = C \cdot e^{i \frac{\mathcal{L}_z}{\hbar} \varphi}$$

jednoznačnost:  $C \cdot e^{i \frac{\mathcal{L}_z}{\hbar} \varphi} = C \cdot e^{i \frac{\mathcal{L}_z}{\hbar} (\varphi + 2\pi)} = C \cdot \left[ \cos \left( \frac{\mathcal{L}_z}{\hbar} (\varphi + 2\pi) \right) + i \sin \left( \frac{\mathcal{L}_z}{\hbar} (\varphi + 2\pi) \right) \right]$

$$\mathcal{L}_z = m \cdot \hbar$$

kde  $m$  je celé číslo; tento vztah je 1. Bohrovým postulátem

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

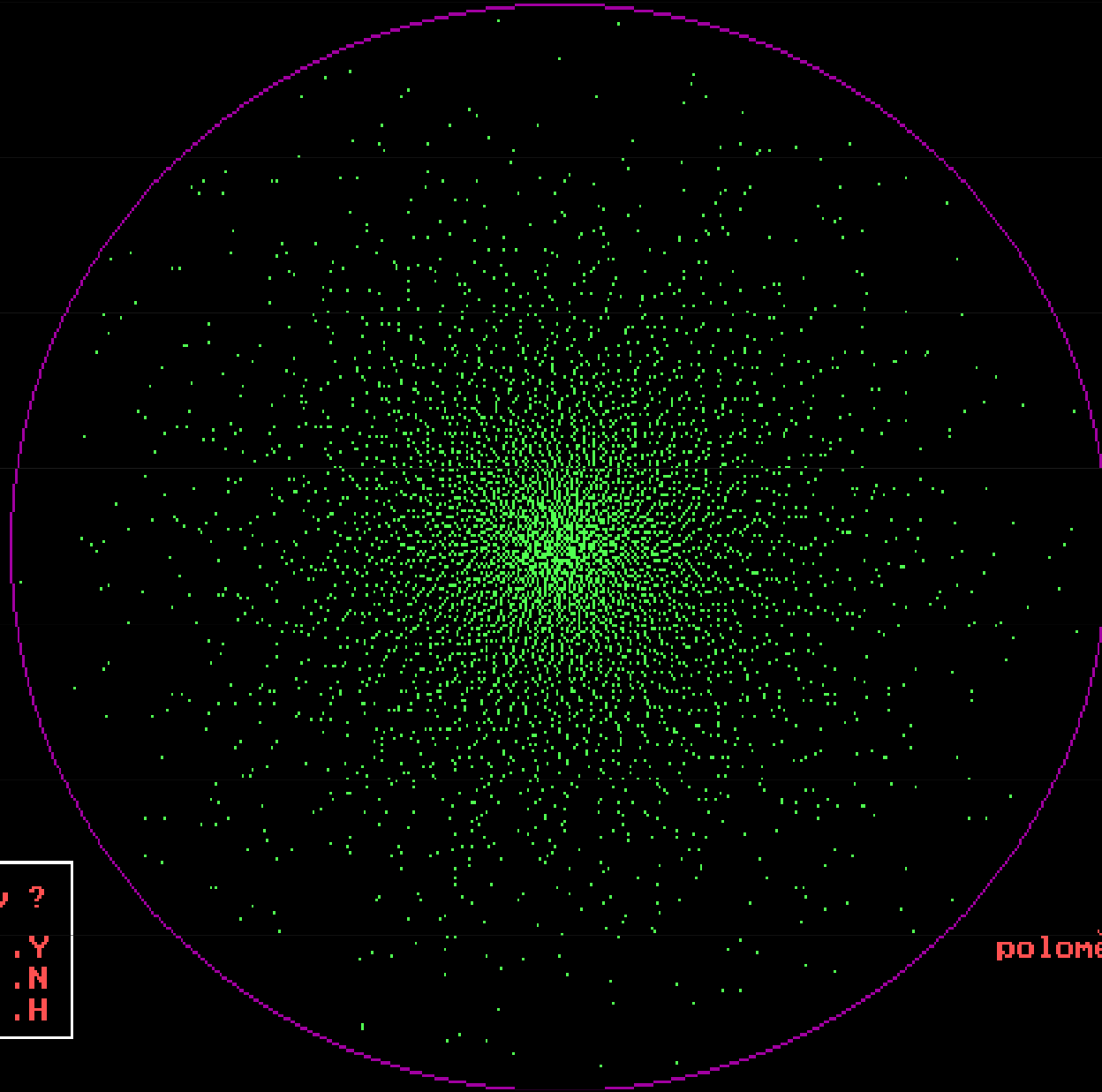
### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

atom vodíku v základním stavu

$$\psi_{100} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

0.982

n=1  
l=0  
m=0



další stav ?

ano.....Y  
ne.....N  
rad.hust...H

poloměr je 3.0 a

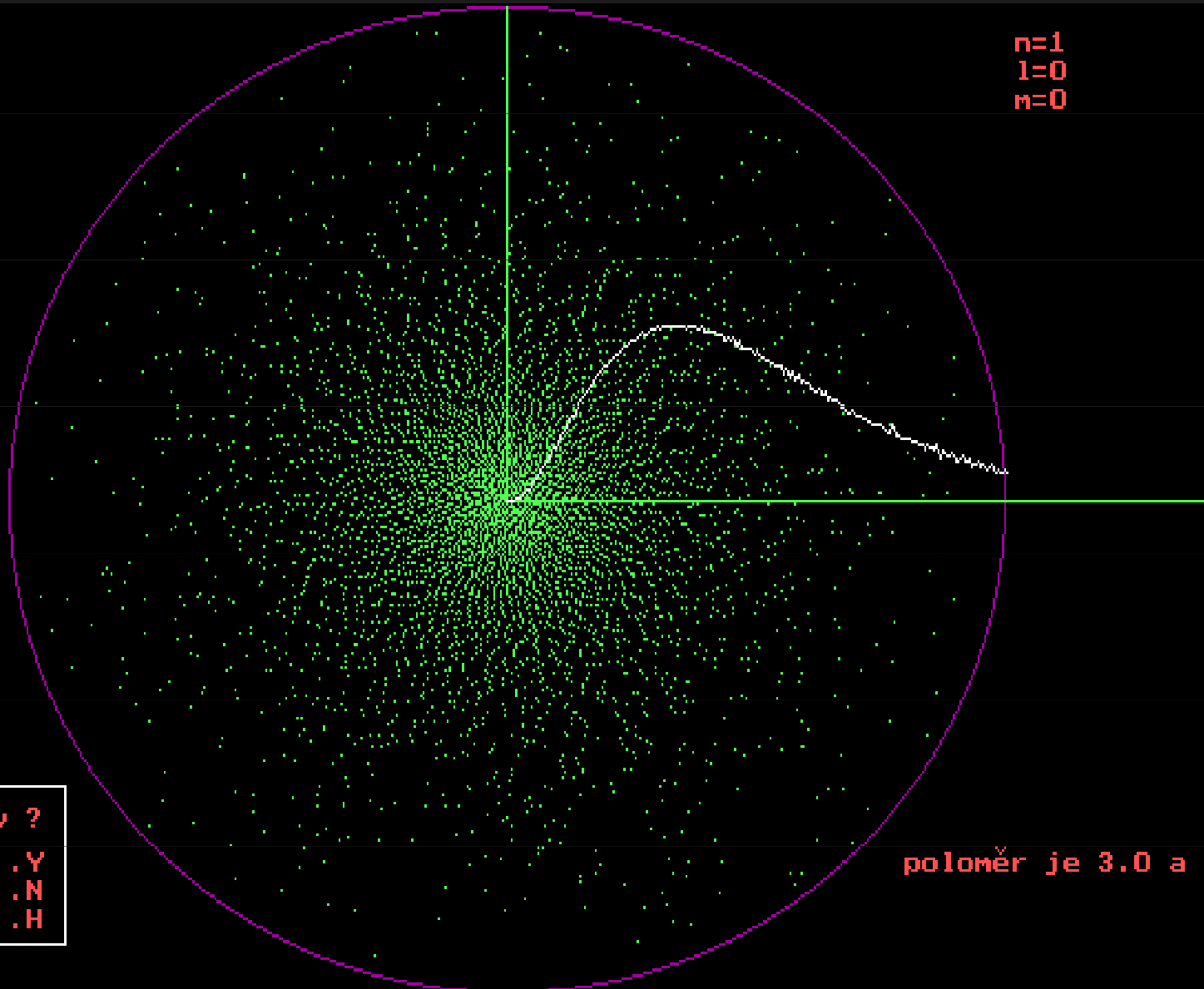
## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

radiální hustota pravděpodobnosti výskytu  $P(r) = \frac{2}{\pi} \cdot \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot r^2 \cdot \sin v \cdot dv d\varphi$

0.982

n=1  
l=0  
m=0



další stav ?

ano.....Y  
ne.....N  
rad.hust...H

poloměr je 3.0 a

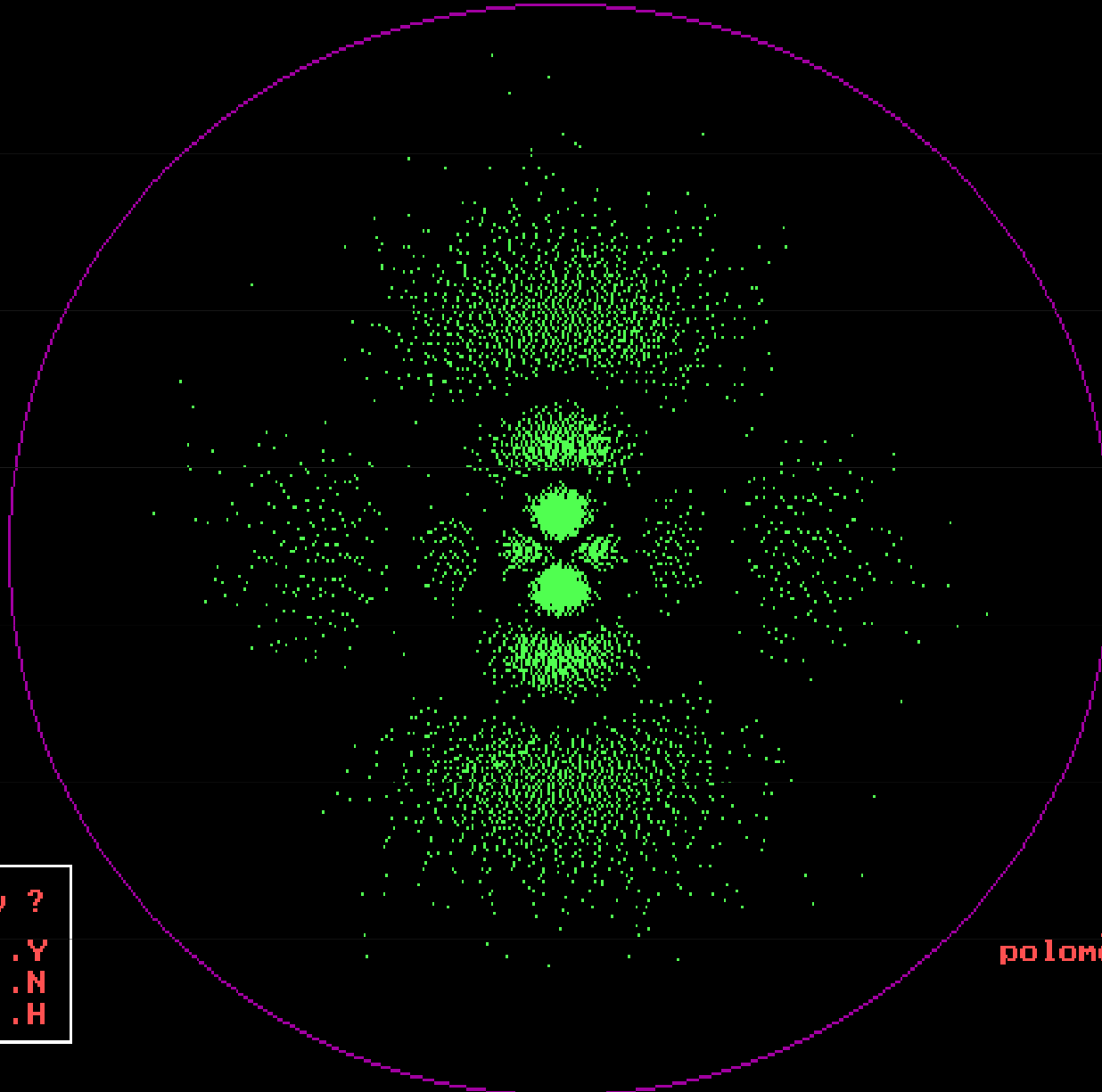
## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

excitovaný stav atomu vodíku  $\psi_{520} = \sqrt{\frac{56}{78125}} \cdot \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \cdot \left[1 - \frac{2}{15} \cdot \frac{r}{a_0} + \frac{2}{525} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right] e^{-\frac{r}{5a_0}} \cdot \frac{2}{\sqrt{11\pi}} (3\cos^2\vartheta - 1)$

1.021

n=5  
l=2  
m=0



další stav ?

ano.....Y  
ne.....N  
rad.hust...H

poloměr je 80.0 a

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 2. Hodnoty fyzikálních veličin

souměřitelnost: V kvantové mechanice existují dvojice fyzikálních veličin, které nejsou současně měřitelné s libovolnou přesností (relace neurčitosti)

$$x, p_x \quad L_x, L_y \quad L_x, L_z \quad L_z, L_y$$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 3. Princip totožnosti a Pauliův vylučovací princip

Částice se stejnými fyzikálními vlastnostmi jsou navzájem **nerozlišitelné**.

nelze zjistit výměny dvou částic, tj. nesmí se změnit rozložení hustoty pravděpodobnosti výskytu:

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2$$

existují dvě možnosti, jak tento vztah splnit:

$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$  částice, které se řídí tímto vztahem jsou **bosony**

$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$  částice, které se řídí tímto vztahem jsou **fermiony**

Třídy částic mají názvy podle statistických rozdělení, kterými se skupiny částic daného typu řídí: Boseho-Einsteinovo a Fermiho-Diracovo

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

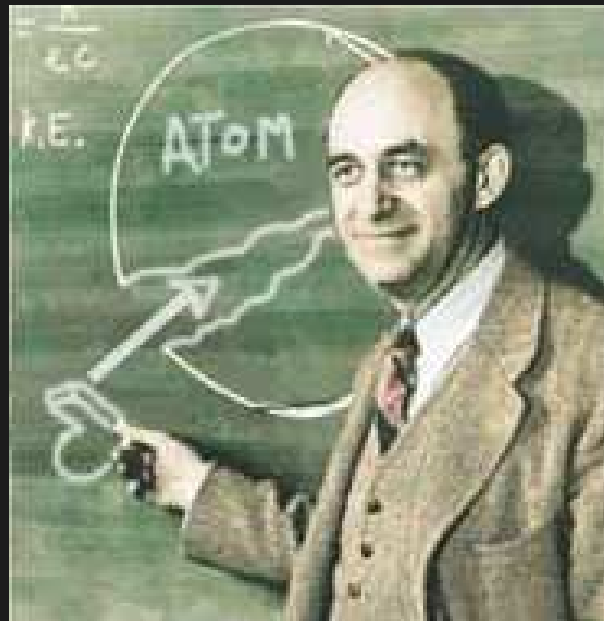
2. 1. 3. Princip totožnosti a Pauliův vylučovací princip

pro fermiony platí **Pauliův vylučovací princip**:

**V soustavě stejných fermionů nemohou existovat 2 fermiony v totožném stavu.**



Wolfgang Pauli (1900-1958)



Enrico Fermi (1901-1954)



Paul Dirac (1902-1984)



## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 4. Spektra fyzikálních veličin

energie  $E$ :  $\hat{H}\psi = E\psi$ , liší se podle  $U$  (silového pole)

$E$  — spojitá (volná částice)  
— diskrétní (kvantovaná)

elektron v poli jádra:  $E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$

jednorozměrná potenciálová jáma:  $E_n = -\frac{h^2}{8ma^2} n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$

lineární harmonický oscilátor:  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$

**poslední dva případy:  $E > 0$**

hybnost  $p$ : spojitá ve všech složkách, všechny složky souměřitelné

moment hybnosti  $L$ : složky i velikost kvantovány, složky vzájemně nesouměřitelné

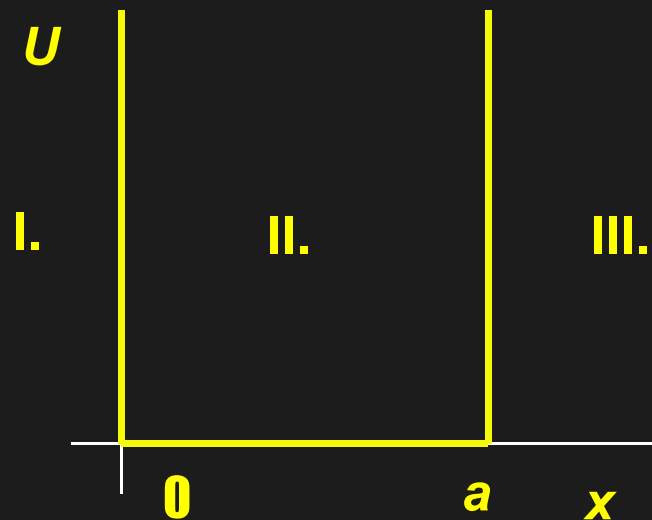
$$L = \sqrt{l \cdot (l + 1)} \cdot \hbar \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, l$$

$$L_z = m\hbar \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 5. Částice v jednorozměrné potenciálové jámě



$$U = \infty \quad x < 0 \quad \wedge \quad x > a$$

$$U = 0 \quad x \in \langle 0, a \rangle$$

$$\text{I.} + \text{III.} \quad \psi = 0$$

$$\text{II.} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$$

$$\psi = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad \text{kde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{spojitost v } 0: \quad 0 = C_1 + C_2 \quad \text{spojitost v } a: \quad 0 = C_1 e^{ika} + C_2 e^{-ika}$$

$$C_1 = -C_2 \Rightarrow 0 = e^{ika} - e^{-ika} \Rightarrow 0 = 2i \sin ka \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

$$\psi = C_1 e^{ikx} - C_1 e^{-ikx} = 2iC_1 \cdot \sin kx = C \cdot \sin kx = C \cdot \sin \frac{n\pi}{a} x \quad \Rightarrow \quad n \neq 0$$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 1. Základní pojmy a zákonitosti kvantové mechaniky

#### 2. 1. 5. Částice v jednorozměrné potenciálové jámě

$$\frac{n\pi}{a} = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \cdot n^2$$

$$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} \cdot n^2$$

určení konstanty ve vlnové funkci  $\psi = C \cdot \sin \frac{n\pi}{a} x$

podmínkou normování:  $\int_0^a |\psi|^2 dx = \int_0^a \psi \cdot \psi^* dx = 1$

$$|C|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x \cdot dx = |C|^2 \left( \frac{a}{2} - \frac{1}{2} \int_0^a \cos \frac{2n\pi}{a} x \cdot dx \right) = |C|^2 \left( \frac{a}{2} - \frac{1}{2} \underbrace{\left[ \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{a} x \right]_0^a}_{0} \right) = 1$$

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

konečná podoba vlnové funkce:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin \frac{n\pi}{a} x$$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 2. Vlastnosti elektronu v atomovém obalu

stav elektronu je jednoznačně určen 4 kvantovými čísly:

**$n$**  – hlavní kvantové číslo – určuje energii elektronu v poli jádra:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

**$l$**  – vedlejší kvantové číslo – velikost orbitálního momentu hybnosti:

$$L = \sqrt{l \cdot (l + 1)} \cdot \hbar \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$$

**$m$**  – magnetické kvantové číslo – složka orbitálního momentu hybnosti:

$$L_z = m \cdot \hbar \quad m = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l$$

**$m_s$**  – spinové kvantové číslo – složka vlastního momentu hybnosti:

$$S_z = m_s \cdot \hbar \quad m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 2. Vlastnosti elektronu v atomovém obalu

poznámky a komentář:

Spin – souhrnné označení vlastností mikročástic, které souvisejí s existencí vlastního momentu hybnosti. U klasických objektů vzniká vlastní moment hybnosti rotací kolem osy procházející těžištěm. U mikročástic je tato vlastnost postulována (spory s teorií relativity).

Proč není kvantována velikost spinového momentu hybnosti?

**U každého momentu hybnosti může složka nabývat  $2s + 1$  hodnot, kde  $s$  je kvantové číslo určující velikost momentu hybnosti. Protože v případě spinového momentu hybnosti je  $2s + 1 = 2$ , platí:**

$$s = \frac{1}{2} \Rightarrow S = \sqrt{s \cdot (s + 1)} \cdot \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar$$

Podle velikosti  $n$  se elektrony dělí do slupek: K, L, M, N, ...

Podle velikosti  $l$  se elektrony dělí do orbitů (drah): s, p, d, f, ...

Nejznámější projevy spinu: dublety ve spektru (Na 589,0 nm + 589,6 nm), Sternův-Gerlachův pokus

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 2. Vlastnosti elektronu v atomovém obalu

Pauliův vylučovací princip pro elektrony v atomovém obalu:

**V elektronovém obalu atomu nemohou existovat dva elektrony, které by měly všechna 4 kvantová čísla stejná.**

slupka	$n$	$l$	$m$	$m_s$
K	1	0	0	$\frac{1}{2}$
K	1	0	0	$-\frac{1}{2}$
L	2	0	0	$\frac{1}{2}$
L	2	0	0	$-\frac{1}{2}$
L	2	1	-1	$\frac{1}{2}$
L	2	1	-1	$-\frac{1}{2}$
L	2	1	0	$\frac{1}{2}$
L	2	1	0	$-\frac{1}{2}$
L	2	1	1	$\frac{1}{2}$
L	2	1	1	$-\frac{1}{2}$

Výpočet maximálního počtu elektronů v  $n$ -té slupce:

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2 \cdot (2l + 1) = 2 \cdot \frac{n}{2} \{ [2(n-1) + 1] + 1 \} = 2n^2$$

počet možných  $l$

počet možných  $m_s$

počet možných  $m$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2.3 Orbitální a spinový magnetický moment

Elektron s  $l \neq 0$  má orbitální moment hybnosti (v klasické fyzice je to spojeno s křivočarým pohybem), má náboj (-e), z toho plyne, že se chová jako závit protékaný stejnosměrným elektrickým proudem, proto má i **orbitální magnetický moment**.

Poměr složek orbitálního magnetického momentu a orbitálního momentu hybnosti je konstantní:

$$\frac{M_z}{L_z} = -\frac{e}{2m_0} \Rightarrow M_z = -m \cdot \frac{e\hbar}{2m_0}$$

$$M_z = -m\mu_B, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0}$$

$$\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1} \quad \text{Bohrův magneton}$$

Mikročástice mají vlastní moment hybnosti a vlastní magnetický moment (jako postulát, později vyplynulo z relativistické kvantové teorie Diraca).

$$\frac{M_{sz}}{S_z} = -\frac{e}{m_0} \Rightarrow M_{sz} = -m_s \cdot \frac{e\hbar}{m_0} = -2m_s \cdot \mu_B$$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 4. Energie elektronu v atomovém obalu

Základním vztahem pro energii je energie elektronu v poli jádra:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

I když je v obalu jediný elektron, není uvedená energie jediným příspěvkem k celkové energii. Pokud má elektron nenulové vedlejší kvantové číslo, má i nenulový orbitální magnetický moment. Protože má zároveň i spinový magnetický moment, vzniká interakcí těchto momentů (které mohou být různě velké a různě orientované, přídavná energie, která může nabývat  $2l + 1$  různých hodnot - spin-orbitální interakce – vysvětlení jemné struktury spektrálních čar. Z toho vyplývá, že energie elektronu závisí i na vedlejším, magnetickém a spinovém kvantovém čísle:

$$E = E_n + \Delta E_{ls}$$



## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 4. Energie elektronu v atomovém obalu

V obalu je více elektronů: k předchozí energii přispívají další přídavné energie, které vznikají interakcí elektronů mezi sebou:

- Coulombovská interakce elektronů mezi sebou
- interakce orbitálních magnetických momentů  $I_i \leftrightarrow I_j$
- interakce orbitálních a spinových magnetických momentů  $I_i \leftrightarrow S_j$
- výměnné interakce
- interakce  $I_i \leftrightarrow S_i$
- interakce  $S_i \leftrightarrow S_j$
  
- interakce orbitálních a spinových magnetických momentů elektronů s magnetickým momentem jádra

# 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

## 2. 5. Periodická soustava prvků

1869 Mendělejev



Prvky vypsal spolu s atomovými „vahami“ na papírky, seřazoval je do řádek. Když narazil na skokovou změnu v chemických a fyzikálních vlastnostech (F-Na, Cl-K), začal novou řádku. Hlavním úspěchem tohoto uspořádání byla předpověď nových prvků: ekaaluminium – gallium  
ekabór – scandium  
ekasalicium – germanium

Dimitrij Ivanovič  
Mendělejev (1834-1907)

1																		18																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
1																		2																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
<b>H</b> 1.008																		<b>He</b> 4.003																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
3																		4																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
<b>Li</b> 6.941																		<b>Be</b> 9.012																		<b>B</b> 10.81																		<b>C</b> 12.01																		<b>N</b> 14.01																		<b>O</b> 16.00																		<b>F</b> 19.00																		<b>Ne</b> 20.18																																																																																																																																																																																																					
11																		12																		13																		14																		15																		16																		17																		18																																																																																																																																																																																																					
<b>Na</b> 22.99																		<b>Mg</b> 24.31																		<b>Al</b> 26.98																		<b>Si</b> 28.09																		<b>P</b> 30.97																		<b>S</b> 32.07																		<b>Cl</b> 35.45																		<b>Ar</b> 39.95																																																																																																																																																																																																					
19																		20																		21																		22																		23																		24																		25																		26																		27																		28																		29																		30																		31																		32																		33																		34																		35																		36																	
<b>K</b> 39.10																		<b>Ca</b> 40.08																		<b>Sc</b> 44.96																		<b>Ti</b> 47.88																		<b>V</b> 50.94																		<b>Cr</b> 52.00																		<b>Mn</b> 54.94																		<b>Fe</b> 55.85																		<b>Co</b> 58.93																		<b>Ni</b> 58.69																		<b>Cu</b> 63.55																		<b>Zn</b> 65.39																		<b>Ga</b> 69.72																		<b>Ge</b> 72.61																		<b>As</b> 74.92																		<b>Se</b> 78.96																		<b>Br</b> 79.90																		<b>Kr</b> 83.80																	
37																		38																		39																		40																		41																		42																		43																		44																		45																		46																		47																		48																		49																		50																		51																		52																		53																		54																	
<b>Rb</b> 85.47																		<b>Sr</b> 87.62																		<b>Y</b> 88.91																		<b>Zr</b> 91.22																		<b>Nb</b> 92.91																		<b>Mo</b> 95.94																		<b>Tc</b> 98.91																		<b>Ru</b> 101.1																		<b>Rh</b> 102.9																		<b>Pd</b> 106.4																		<b>Ag</b> 107.9																		<b>Cd</b> 112.4																		<b>In</b> 114.8																		<b>Sn</b> 118.7																		<b>Sb</b> 121.8																		<b>Te</b> 127.6																		<b>I</b> 126.9																		<b>Xe</b> 131.3																	
55																		56																		71																		72																		73																		74																		75																		76																		77																		78																		79																		80																		81																		82																		83																		84																		85																		86																	
<b>Cs</b> 132.9																		<b>Ba</b> 137.3																		<b>Lu</b> 175.0																		<b>Hf</b> 178.5																		<b>Ta</b> 180.9																		<b>W</b> 183.8																		<b>Re</b> 186.2																		<b>Os</b> 190.2																		<b>Ir</b> 192.2																		<b>Pt</b> 195.1																		<b>Au</b> 197.0																		<b>Hg</b> 200.6																		<b>Tl</b> 204.4																		<b>Pb</b> 207.2																		<b>Bi</b> 209.0																		<b>Po</b> 209.0																		<b>At</b> 210.0																		<b>Rn</b> 222.0																	
87																		88																		103																		104																		105																		106																		107																		108																		109																		110																		111																		112																		113																		114																		115																		116																		117																		118																	
<b>Fr</b> 223.0																		<b>Ra</b> 226.0																		<b>Lr</b> 262.1																		<b>Rf</b> 261.1																		<b>Db</b> 262.1																		<b>Sg</b> 263.1																		<b>Bh</b> 264.1																		<b>Hs</b> 265.1																		<b>Mt</b> 268																		<b>Uun</b> 269																		<b>Uuu</b> 272																		<b>Uub</b> 277																		<b>Uut</b> 289																		<b>Uuq</b> 289																		<b>Uup</b> 289																		<b>Uuh</b> 289																		<b>Uus</b> 293																																			
6																		7																		57																		58																		59																		60																		61																		62																		63																		64																		65																		66																		67																		68																		69																		70																																																					
																																				<b>La</b> 138.9																		<b>Ce</b> 140.1																		<b>Pr</b> 140.9																		<b>Nd</b> 144.2																		<b>Pm</b> 146.9																		<b>Sm</b> 150.4																		<b>Eu</b> 152.0																		<b>Gd</b> 157.3																		<b>Tb</b> 158.9																		<b>Dy</b> 162.5																		<b>Ho</b> 164.9																		<b>Er</b> 167.3																		<b>Tm</b> 168.9																		<b>Yb</b> 173.0																																																					
																																				89																		90																		91																		92																		93																		94																		95																		96																		97																		98																		99																		100																		101																		102																																																					
																																				<b>Ac</b> 227.0																		<b>Th</b> 232.0																		<b>Pa</b> 231.0																		<b>U</b> 238.0																		<b>Np</b> 237.0																		<b>Pu</b> 244.1																		<b>Am</b> 243.1																		<b>Cm</b> 247.1																		<b>Bk</b> 247.1																		<b>Cf</b> 251.1																		<b>Es</b> 252.0																		<b>Fm</b> 257.1																		<b>Md</b> 258.1																		<b>No</b> 259.1																																																					

# 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

## 2. 5. Periodická soustava prvků

Hundova pravidla: pořadí zaplňování stavů se řídí součtem  $n + l$ , jsou-li 2 kombinace rovny, přednost má kombinace s menším  $n$ ; pokud je to možné, zaujímají elektrony stavy se stejným  $m_s$

1s	1			
2s	2			
2p	3s	3		
3p	4s	4		
3d	4p	5s	5	
4d	5p	6s	6	
4f	5d	6p	7s	7
5f	6d	7p	8s	8

1s	2
2s, 2p	$2 + 6 = 8$
3s, 3p	$2 + 6 = 8$
4s, 3d, 4p	$2 + 10 + 6 = 18$
5s, 4d, 5p	$2 + 10 + 6 = 18$
6s, 4f, 5d, 6p	$2 + 14 + 10 + 6 = 32$
7s, 5f, 6d, 7p	$2 + 14 + 10 + 6 = 32$

1		2										3										4										5										6										7									
1		2		3		4		5		6		7		8		9		10		11		12		13		14		15		16		17		18																											
1	H 1.008	2	He 4.003	3	Li 6.941	4	Be 9.012	5	B 10.81	6	C 12.01	7	N 14.01	8	O 16.00	9	F 19.00	10	Ne 20.18	11	Na 22.99	12	Mg 24.31	13	Al 26.98	14	Si 28.09	15	P 30.97	16	S 32.07	17	Cl 35.45	18	Ar 39.95																										
19	K 39.10	20	Ca 40.08	21	Sc 44.96	22	Ti 47.88	23	V 50.94	24	Cr 52.00	25	Mn 54.94	26	Fe 55.85	27	Co 58.93	28	Ni 58.69	29	Cu 63.55	30	Zn 65.39	31	Ga 69.72	32	Ge 72.61	33	As 74.92	34	Se 78.96	35	Br 79.90	36	Kr 83.80																										
37	Rb 85.47	38	Sr 87.62	39	Y 88.91	40	Zr 91.22	41	Nb 92.91	42	Mo 95.94	43	Tc 98.91	44	Ru 101.1	45	Rh 102.9	46	Pd 106.4	47	Ag 107.9	48	Cd 112.4	49	In 114.8	50	Sn 118.7	51	Sb 121.8	52	Te 127.6	53	I 126.9	54	Xe 131.3																										
55	Cs 132.9	56	Ba 137.3	57	La 138.9	58	Ce 140.1	59	Pr 140.9	60	Nd 144.2	61	Pm 146.9	62	Sm 150.4	63	Eu 152.0	64	Gd 157.3	65	Tb 158.9	66	Dy 162.5	67	Ho 164.9	68	Er 167.3	69	Tm 168.9	70	Yb 173.0	71	Lu 174.97	72	Hf 178.49																										
87	Fr 223.0	88	Ra 226.0	89	Ac 227.0	90	Th 232.0	91	Pa 231.0	92	U 238.0	93	Np 237.0	94	Pu 244.1	95	Am 243.1	96	Cm 247.1	97	Bk 247.1	98	Cf 251.1	99	Es 252.0	100	Fm 257.1	101	Md 258.1	102	No 259.1	103	Lr 260.1	104	Rf 261.1																										

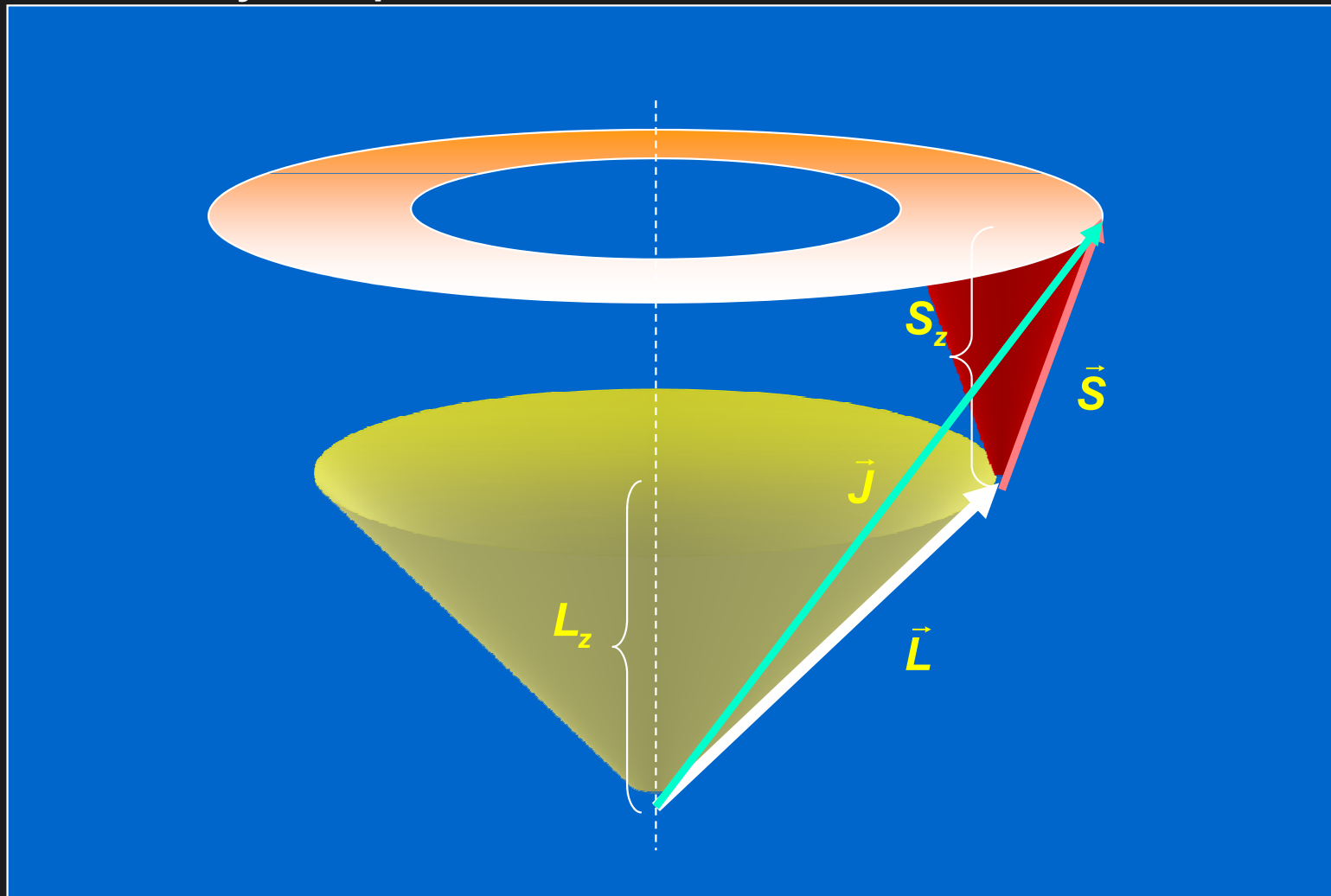
valenční sféra, valenční elektrony:  
chemické vlastnosti  
elektronový oktet sp: netečné plyny  
alkalické kovy  
halogeny  
lanthanoidy  $_{57}\text{La} \rightarrow _{71}\text{Lu}$   
aktinoidy  $_{89}\text{Ac} \rightarrow _{103}\text{Lw}$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 6. Vektorový model atomu

zabývá se energií elektronového obalu pro atomy s více elektrony bez ohledu na velikosti jednotlivých kvantových čísel elektronů

Základní myšlenka: 1 elektron má 2 momenty hybnosti, které nejsou dokonale poznatelné, můžeme určit jen velikost a jednu složku. Součet těchto vektorů by byl „rozmazán“ daleko více než kterýkoli z původních vektorů.



## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 6. Vektorový model atomu

Celkový (úhrnný) moment hybnosti musí být kvantován jako každý jiný moment hybnosti:

$$J = \sqrt{j \cdot (j + 1)} \cdot \hbar \quad J_z = m_j \hbar$$

Velikost orbitálního momentu hybnosti je dána kvantovým číslem  $l$ , spinový může vůči němu zaujímat dva různé směry. Kvantové číslo  $j$  proto nabývá nejvýše dvou hodnot:

$$j = l + \frac{1}{2}, \left| l - \frac{1}{2} \right| \quad \left( \text{při } l = 0 \text{ je pouze } j = \frac{1}{2} \right)$$

Kvantové číslo  $m_j$  pak může nabývat  $2j + 1$  hodnot:

$$m_j = -j, -j + 1, \dots, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, \dots, j - 1, j$$

Pro  $N$  elektronů je zavedení celkového momentu hybnosti všech elektronů ještě významnější, protože změna energie elektronového obalu závisí na změnách celého obalu. Při určování celkového momentu hybnosti elektronového obalu je vzhledem k neurčitosti možné použít dvou postupů:

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 6. Vektorový model atomu

Pro lehčí atomy je vhodnější způsob označovaný LS:

$$\vec{L} = \sum \vec{L}_i \quad \vec{S} = \sum \vec{S}_i \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Pro těžší atomy je vhodnější způsob označovaný jj:

$$\vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i \quad \vec{J} = \sum \vec{J}_i$$

Kvantování všech 3 momentů hybnosti elektronového obalu:

$$\mathcal{L} = \sqrt{L \cdot (L + 1)} \cdot \hbar \quad \mathcal{L}_z = m_L \hbar \quad L = 0, 1, 2, \dots, \sum l_i \quad m_L = -L, \dots, -1, 0, 1, \dots, +L$$

$$\mathcal{S} = \sqrt{S \cdot (S + 1)} \cdot \hbar \quad \mathcal{S}_z = m_S \hbar \quad \text{pro } n \text{ sudé: } S = 0, 1, 2, \dots, \frac{n}{2} \quad m_S = -S, \dots, -1, 0, 1, \dots, +S$$

$$\text{pro } n \text{ liché: } S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{n}{2} \quad m_S = -S, \dots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, +S$$

$$\mathcal{J} = \sqrt{J \cdot (J + 1)} \cdot \hbar \quad \mathcal{J}_z = m_J \hbar \quad J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S| \quad m_J = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$$

$2S + 1$  hodnot pro  $L > S$ ,  $2L + 1$  hodnot pro  $S > L$

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 6. Vektorový model atomu

Stavy s různými čísly  $L$ ,  $S$ ,  $J$  mají různé energie.

Plně obsazené orbity k  $L$ ,  $S$ ,  $J$  nepřispívají (opačné orientace se odečtou).

Označení energetické hladiny: term  $(n) 2S+1 L_J$

multiplicita

značí se písmeny  $S, P, D, \dots$

Ne všechny kombinace trojic  $LSJ$  jsou možné (Puliův vylučovací princip).

Příklad:

2 elektrony na orbitě  $p$  ( $l = 1$ )

teoreticky:  $L = 0, 1, 2$   
 $S = 0, 1$   
 $J = 0, 1, 2, 3$  } 24 stavů

ve skutečnosti:  $m = 1, m_s = \pm \frac{1}{2}$   
 $m = 0, m_s = \pm \frac{1}{2}$   
 $m = -1, m_s = \pm \frac{1}{2}$  }  $\frac{6 \cdot 5}{2} = 15$  stavů

Kolika různých energií mohou tyto stavy nabývat?

## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 6. Vektorový model atomu

Kolika různých energií mohou tyto stavy nabývat?

$m_1$	$m_2$	$m_{s1}$	$m_{s2}$	$L$	$S$	$J$	term
1	1	↑	↓	2	0	2	$^1D_2$
1	0	↑	↑	1	1	2	$^3P_2$
1	0	↓	↓	1	1	0	$^3P_0$
1	0	↑	↓	1	0	1	$^1P_1$
1	0	↓	↑	1	0	1	$^1P_1$
1	-1	↑	↑	0	1	1	$^3S_1$
1	-1	↓	↓	0	1	1	$^3S_1$
1	-1	↑	↓	0	0	0	$^1S_0$
1	-1	↓	↑	0	0	0	$^1S_0$
0	0	↑	↓	0	0	0	$^1S_0$
-1	0	↑	↑	1	1	0	$^3P_0$
-1	0	↓	↓	1	1	2	$^3P_2$
-1	0	↑	↓	1	0	1	$^1P_1$
-1	0	↓	↑	1	0	1	$^1P_1$
-1	-1	↑	↓	2	0	2	$^1D_2$

← základní term  
(s minimální energií)



## 2. Kvantově-mechanický popis atomového obalu

### 2. 6. Vektorový model atomu

Pořadí příspěvků k energii od vzájemných interakcí:

Pro lehčí atomy LS:

1. výměnná energie
2. Coulombovské odpuzování
3. spin-orbitální interakce

Pro těžší atomy jj:

1. spin-orbitální interakce
2. Coulombovské odpuzování
3. výměnná energie

# 3. spektra atomů

## 3. 1. Optická spektra

Vznikají přechody valenčních elektronů.

Intenzity čar jsou dány pravděpodobnostmi přechodů, které závisejí na způsobu excitace. Přesné výpočty umožňuje kvantová elektrodynamika využívající časového poruchového počtu.

### 3. 1. 1. Výběrová pravidla

Podle výpočtů kvantové mechaniky jsou pravděpodobnosti některých přechodů nulové - takovým přechodům se říká zakázané přechody.

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m = 0, \pm 1$$

$$\Delta m_s = 0$$

pro stav s více elektrony:

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta L = 0, \pm 1$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \text{ s výjimkou } J = 0 \rightarrow J = 0$$

# 3. Spektra atomů

## 3. 1. 1. Výběrová pravidla

Příklad na použití výběrových pravidel:

Kolik čar má jemná struktura čáry  $H_\alpha$  ?

jde o přechod z  $n = 3$  na hladinu  $n = 2$ , u jednoho elektronu jsou velká kvantová čísla totožná s malými

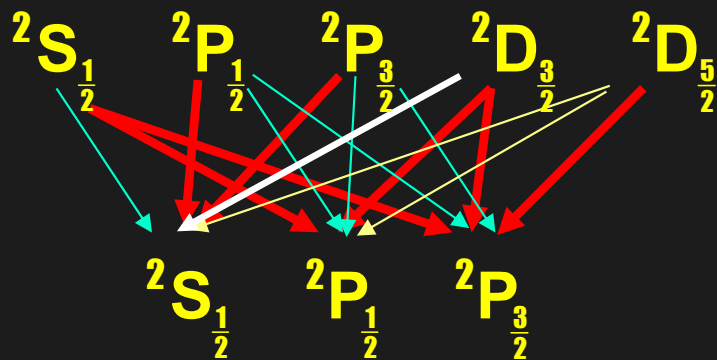
jeden elektron na  $n = 3$  může být ve stavech daných kvantovými čísly:

$$L = 0, 1, 2; \quad S = \frac{1}{2}; \quad J = \left| L \pm \frac{1}{2} \right|$$

na  $n = 2$  může být ve stavech daných kvantovými čísly:

$$L = 0, 1; \quad S = \frac{1}{2}; \quad J = \left| L \pm \frac{1}{2} \right|$$

povolené přechody mezi termy:



$$\Delta l = \pm 1 \Rightarrow S \rightarrow P, P \rightarrow S, D \rightarrow P$$

přechody zakázané podle:

$$\Delta J \leq 1$$

$\Rightarrow$

$$\frac{5}{2} \not\rightarrow \frac{3}{2}$$

přechody zakázané podle:

$$\Delta l \neq 0$$

přechod zakázaný podle:

$$\Delta l \neq 2$$

Sledovaná čára se skládá ze 7 čar jemné struktury: Lambův posuv.

# 3. Spektra atomů

## 3. 1. 1. Výběrová pravidla

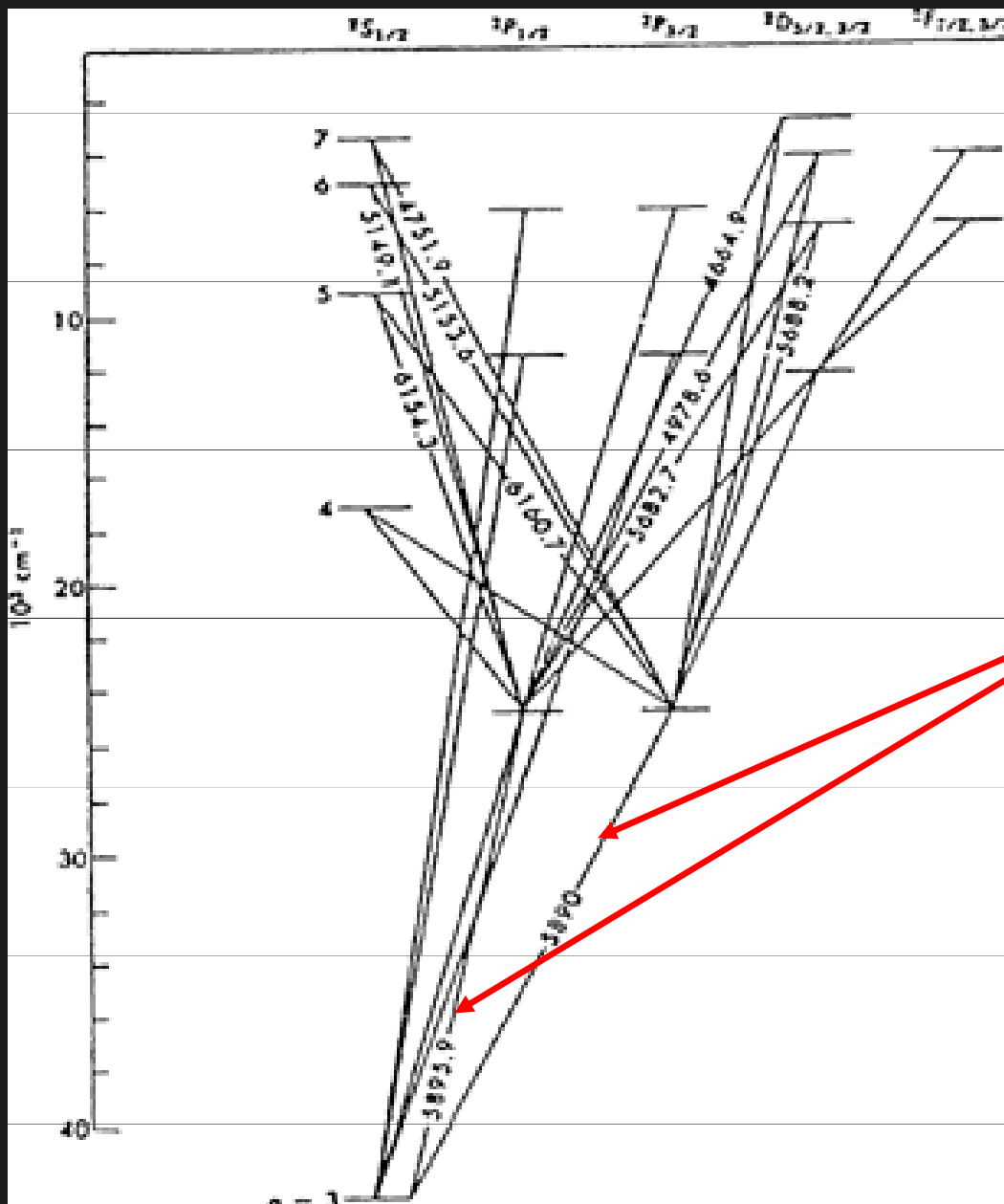


Schéma energetických hladin a povolených přechodů pro valenční elektron sodíku. Ve sloupcích jsou řazeny energetické hladiny podle hlavního kvantového čísla, sloupce odpovídají jednotlivým termům.

Sodíkový dublet: dvě žluté čáry stejné intenzity s velmi blízkou vlnovou délkou. Nepatrná odlišnost energie termů  ${}^2P_{3/2}$  a  ${}^2P_{1/2}$  je důsledkem rozdílné interakce mezi spinovým a orbitálním momentem (projev spinu).

# 3. Spektra atomů

## 3. 1. 2. Výměnné síly

Spektrum hélia:

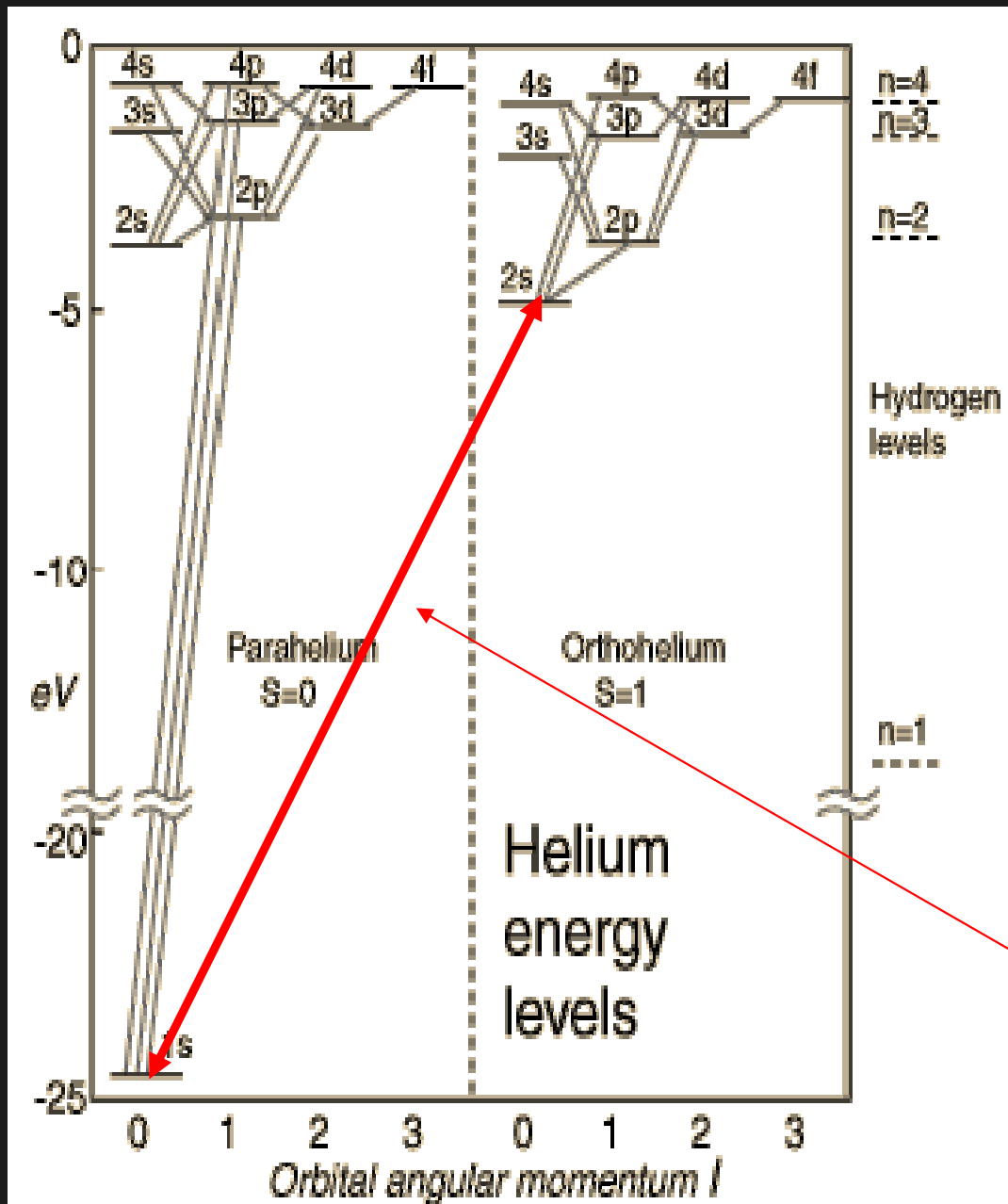


Schéma energetických hladin a povolených přechodů pro helium. Je nutné oddělit stavy s  $S = 0$  (parahelium) a stavy s  $S = 1$  (ortohelium). Vzhledem k výběrovému pravidlu pro  $S$  nejsou mezi nimi povolené přechody.

Coulombovské síly mezi elektrony jsou v obou případech stejné, rozdíly v energiích jsou tedy dány odlišnými interakcemi mezi stavy s paralelními spiny:  $\uparrow\uparrow$  nebo  $\downarrow\downarrow$  a spiny antiparalelními  $\downarrow\uparrow$ . Interakce spinových magnetických momentů jsou přitom slabší než rozdíly energií. Jediné vysvětlení: výměnné síly.

Toto je zakázaný přechod, který se může uskutečnit jen při srážce dvou atomů, při které dojde k výměně elektronů.

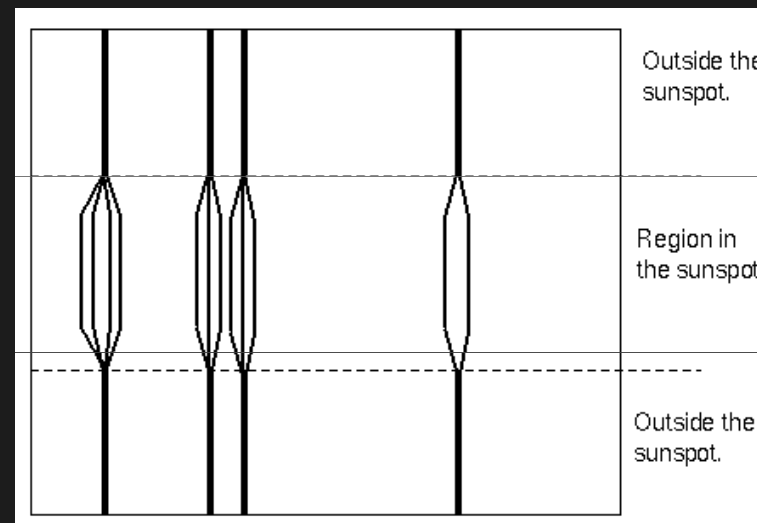
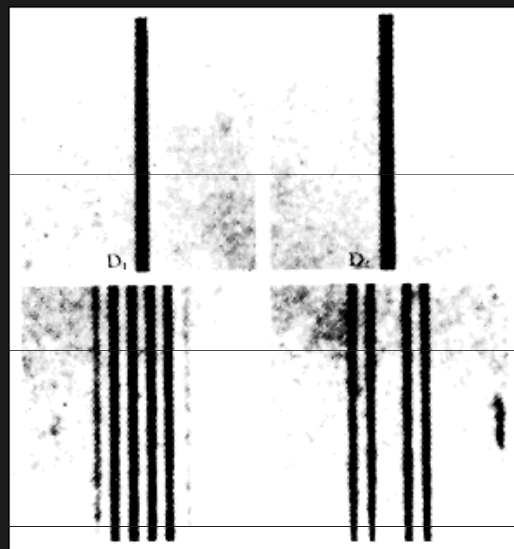
# 3. Spektra atomů

## 3. 1. 3. Magnetooptické jevy

Zeemanův jev (1896): štěpení spektrálních čar v magnetickém poli



Pieter Zeeman (1865-1943)



The Zeeman effect: a strong magnetic field splits the spectral lines into two or more components. The strength of the magnetic field can be measured from the amount of separation of the components. Sunspots are regions of strong magnetic fields.

V magnetickém poli interagují oba magnetické momenty elektronu s vnějším magnetickým polem. Má-li vnější magnetostatické pole změru osy z:

$$\Delta E = M_z B + M_{sz} B$$

$$\Delta E = m \mu_B B + 2m_s \mu_B B = \mu_B B (m + 2m_s)$$

# 3. Spektra atomů

## 3. 1. 3. Magnetooptické jevy

$$\Delta E = m\mu_B B + 2m_s\mu_B B = \mu_B B (m + 2m_s) \quad \Delta \nu = \frac{\mu_B B}{h} (\Delta m + 2\Delta m_s)$$

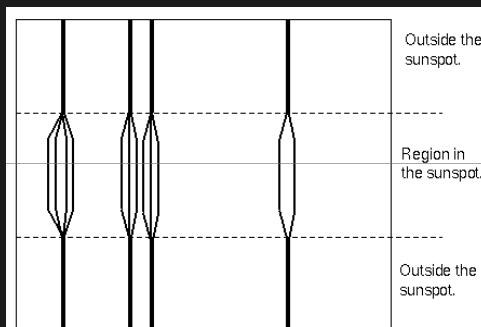
při zářivém přechodu

$$\nu = \nu_0 + \frac{\mu_B B}{h} (\Delta m + 2\Delta m_s) \quad \text{Protože platí výběrová pravidla} \quad \Delta m = 0, \pm 1$$
$$\Delta m_s = 0$$

budou frekvence odpovídající dovoleným přechodům:

$$\nu_1 = \nu_0 \quad \nu_2 = \nu_0 + \frac{\mu_B B}{h} \quad \nu_3 = \nu_0 - \frac{\mu_B B}{h}$$

Původní spektrální čára se rozštěpí na 3 čáry, z nichž jedna bude na původním místě, dvě budou symetricky odchýleny.



The Zeeman effect: a strong magnetic field splits the spectral lines into two or more components. The strength of the magnetic field can be measured from the amount of separation of the components. Sunspots are regions of strong magnetic fields.

## Normální Zeemanův jev

# 3. Spektra atomů

## 3. 1. 3. Magnetooptické jevy

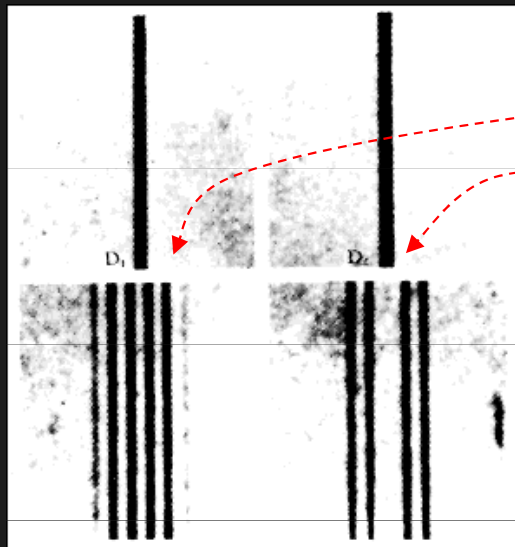
rozštěpení na jiný počet čar: magnetické momenty se skládají jinak než momenty hybnosti (poměr magnetických momentů je proti mechanickým dvojnásobný), proto

$\vec{\mu}$  není rovnoběžný s  $\vec{J}$

Příspěvek k energii  $\Delta E = g \cdot m_J \mu_B B$

$g$  je Landeeho faktor  $g = g(L, S, J)$

Každý energetický stav se v magnetickém poli štěpí na  $2J + 1$  podstavů



sodíkový dublet  ${}^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow {}^2S_{\frac{1}{2}}$  4 + 2, 8 kombinací – 2 (zakázané přechody) = 6 čar

${}^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow {}^2S_{\frac{1}{2}}$  2 + 2, 4 kombinace = 4 čáry

**Anomální Zeemanův jev**



# 3. Spektra atomů

## 3. 1. 4. Spontánní a vynucené přechody

emisní přechod



spontánní, pravděpodobnost  $A_{ki}$

doba života excit. stavu  $10^{-8}$  s

vynucený (indukovaná emise), vzniká dopadem fotonu s energií  $h\nu = E_k - E_i$

pravděpodobnost přechodu  $u(\nu) \cdot B_{ki}$

celková pravděpodobnost emisního přechodu:  $A_{ki} + u(\nu) \cdot B_{ki}$

absorpční přechod



pouze vynucený, pravděpodobnost  $u(\nu) \cdot B_{ik}$

$A_{ki}, B_{ki}, B_{ik}$  Einsteinovy koeficienty

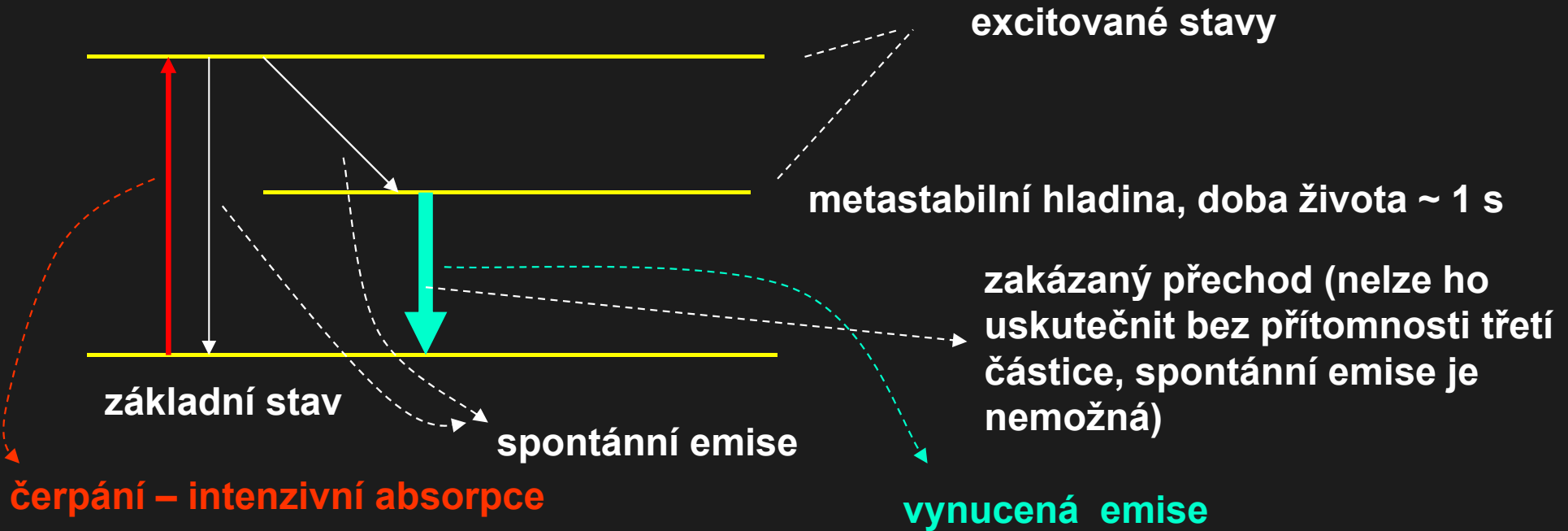
platí:  $B_{ki} = B_{ik}$

**Pravděpodobnost emise je vždy větší než pravděpodobnost absorpce.**

# 3. Spektra atomů

## 3. 1. 4. Spontánní a vynucené přechody

Předchozí tvrzení platí pro libovolné 2 hladiny, v tříhladinovém systému je možné dosáhnout inverzního stavu.



Záření produkované vynucenou emisí je :

**monochromatické**

**koherentní**

**kolimované**

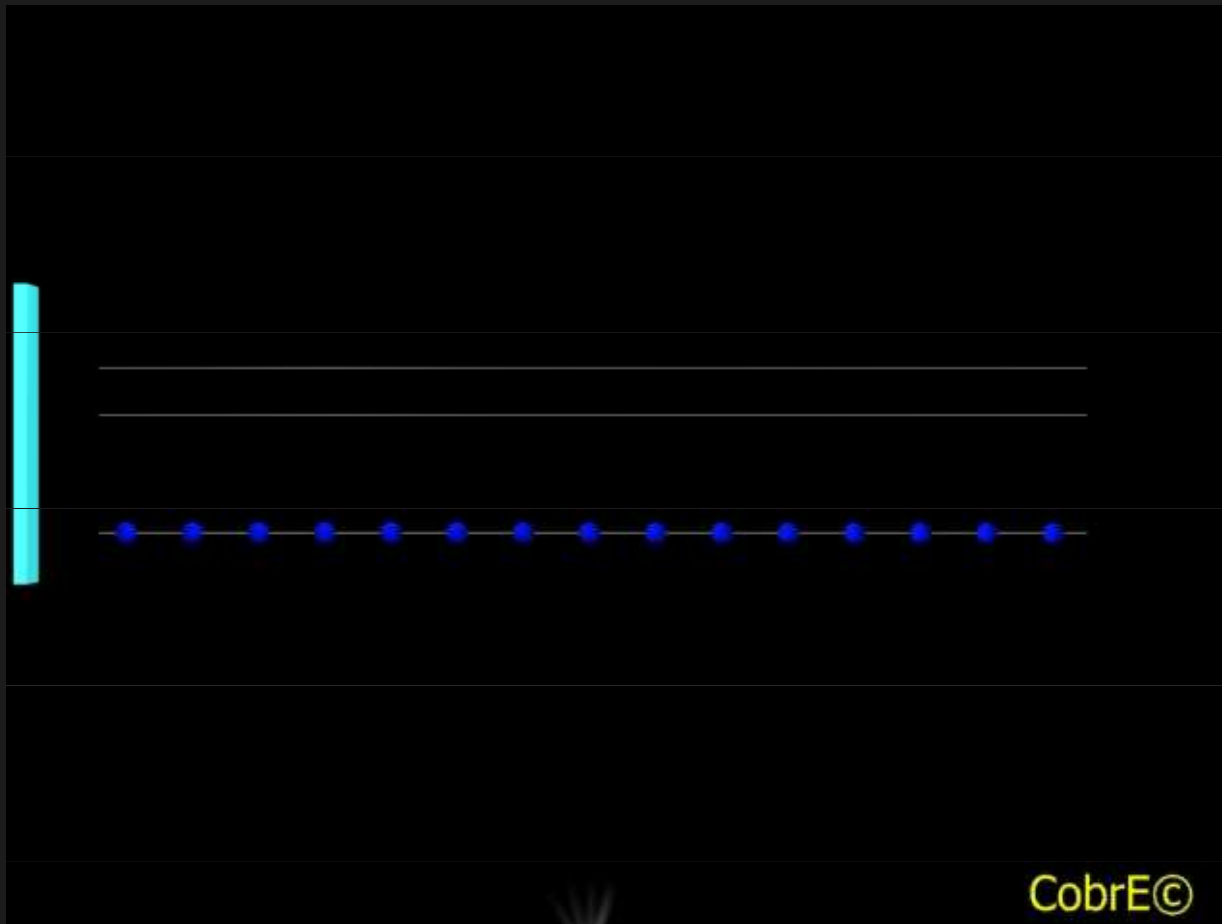
# 3. Spektra atomů

## 3. 1. 4. Spontánní a vynucené přechody

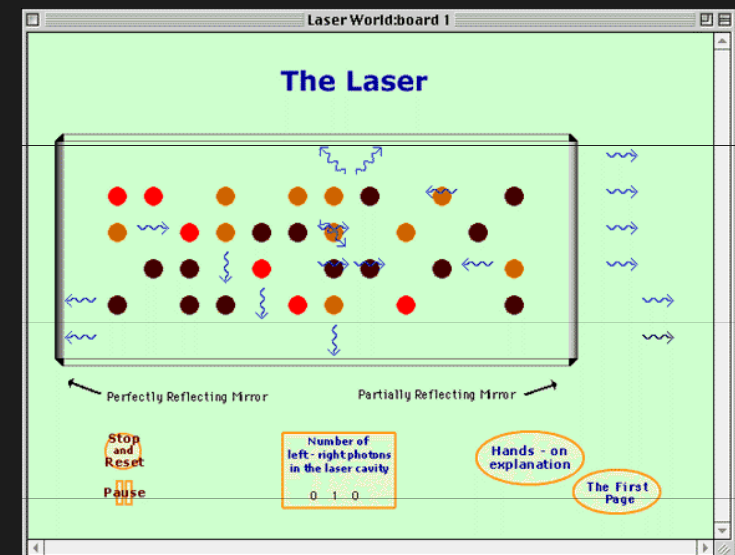
laser Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

maser Microwave

vhodná prostředí: rubín,  $\text{CO}_2$ ,  
neodymové sklo, He+Ne,  
GaAs (polovodičové lasery)



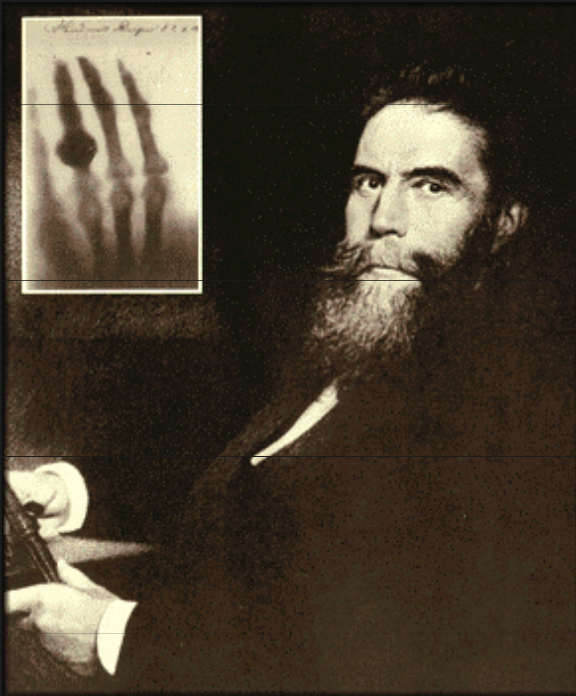
CobrE©



# 3. Spektra atomů

## 3. 2. Rentgenová spektra

1895 – Roentgen: elektromagnetické záření s kratšími vlnovými délkami než ultrafialové: 10 až 0,01 nm



Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923)



ruka poraněná brokovnicí

# 3. Spektra atomů

## 3. 2. Rentgenová spektra



uspořádání podle Coolidge

# 3. Spektra atomů

## 3. 2. Rentgenová spektra

a) brzdné záření: spojité spektrum, nezávisí na materiálu antikatody

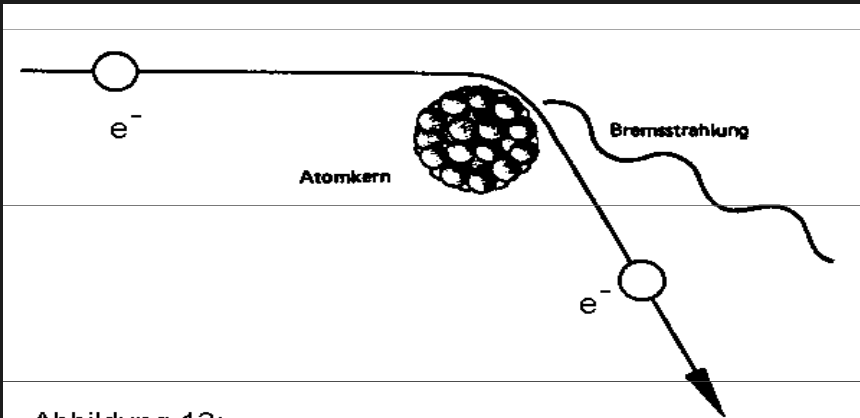
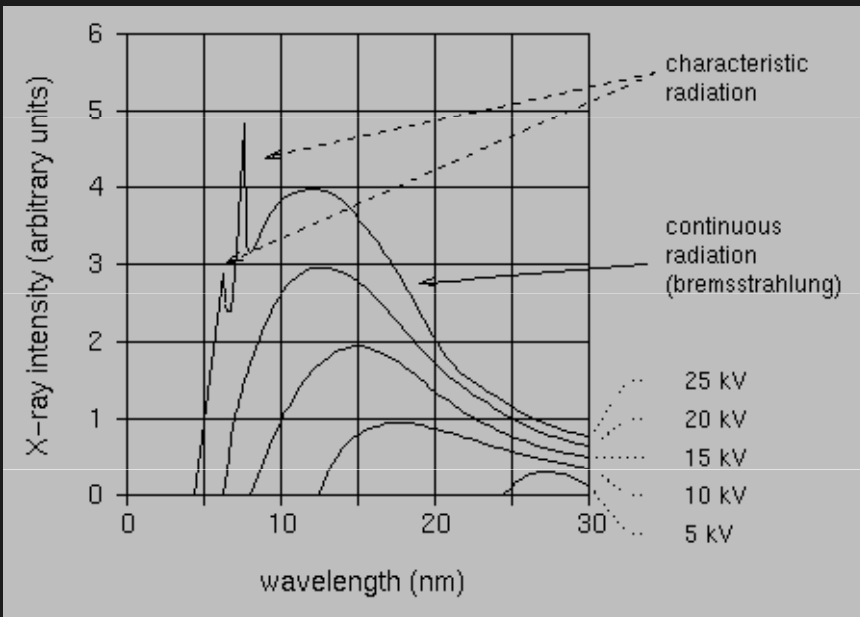
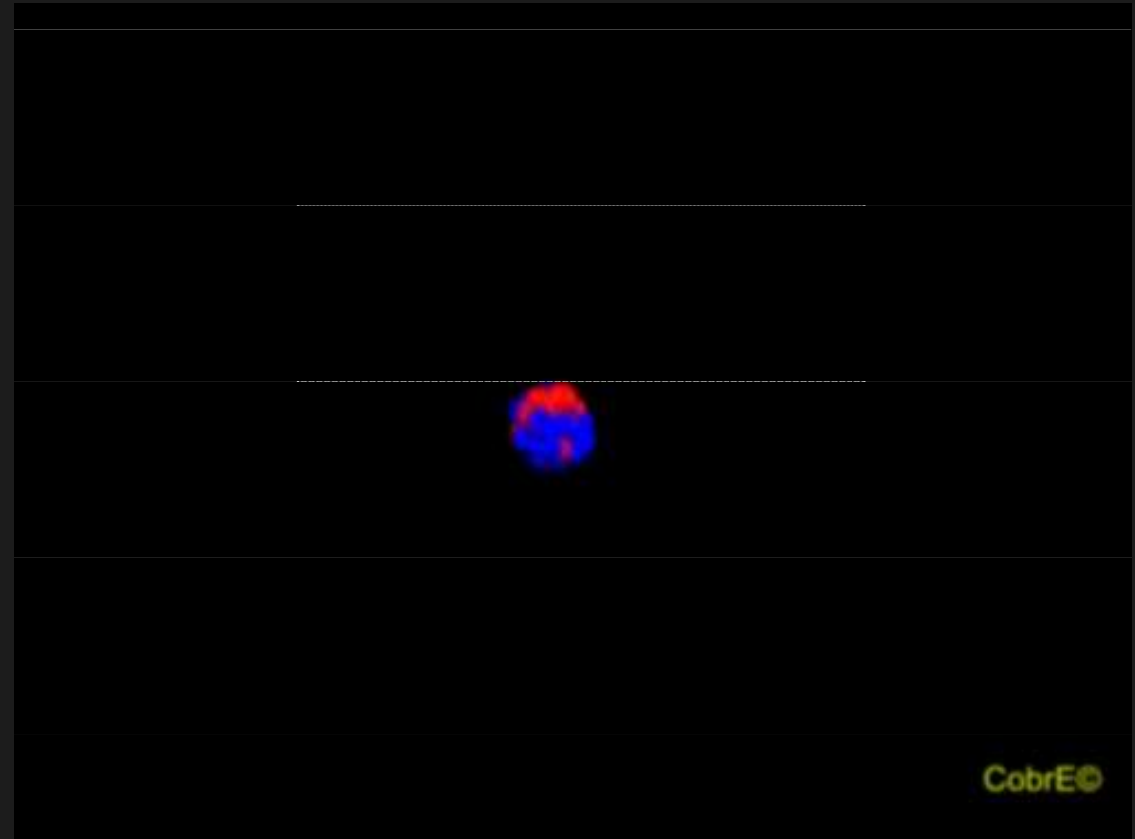


Abbildung 13:

Zur Bremsstrahlung

In der Nähe eines positiv geladenen Atomkerns wird ein Elektron abgebremst. Dabei verliert es Energie, die es in Form von Bremsstrahlung abgibt.



$$eU = h\nu \Rightarrow \lambda_{\min} = \frac{hc}{eU}$$

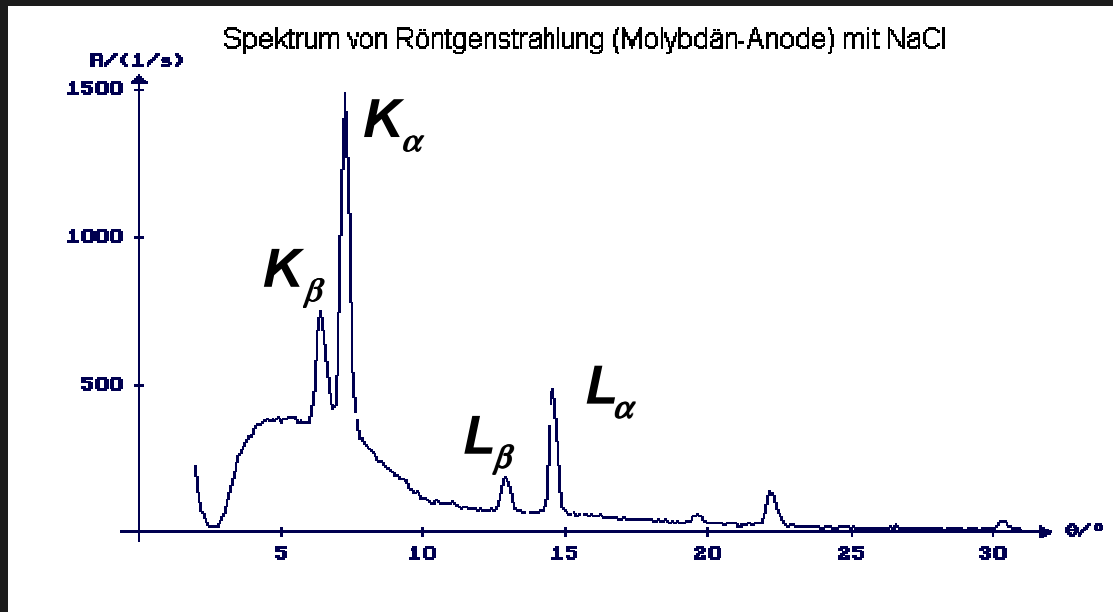
krátkovlnná hranice

$$U = 25 \text{ kV} \Rightarrow \lambda_{\min} = 0,05 \text{ nm}$$

# 3. Spektra atomů

## 3. 2. Rentgenová spektra

b) charakteristické záření: čárové spektrum, závisí na materiálu antikatody



vznik: excitace elektronu v atomu  
z vnitřních vrstev: série

$$K_{\alpha} \approx L \rightarrow K \quad K_{\beta} \approx M \rightarrow K$$

$$L_{\alpha} \approx M \rightarrow L \quad L_{\beta} \approx N \rightarrow L$$

frekvence čar charakteristického Roentgenova spektra popsal Moseley:

$$\sqrt{\nu} = C \cdot (Z - \rho)$$

konstanta čáry

vyjadřuje odstínění slupky,  
ze které elektron přechází  
od jádra

vztah je ve shodě se  
vztahem Balmerovým:

$$\sigma = \frac{\nu}{c} = \Delta \frac{(Z - \rho_i)^2}{n_i^2}$$

# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 1. Stavba molekul

vazba: interakce elektronů ve valenční („vnější“) slupce

2 krajní případy vazeb: 1) iontová (heteropolární) - NaCl

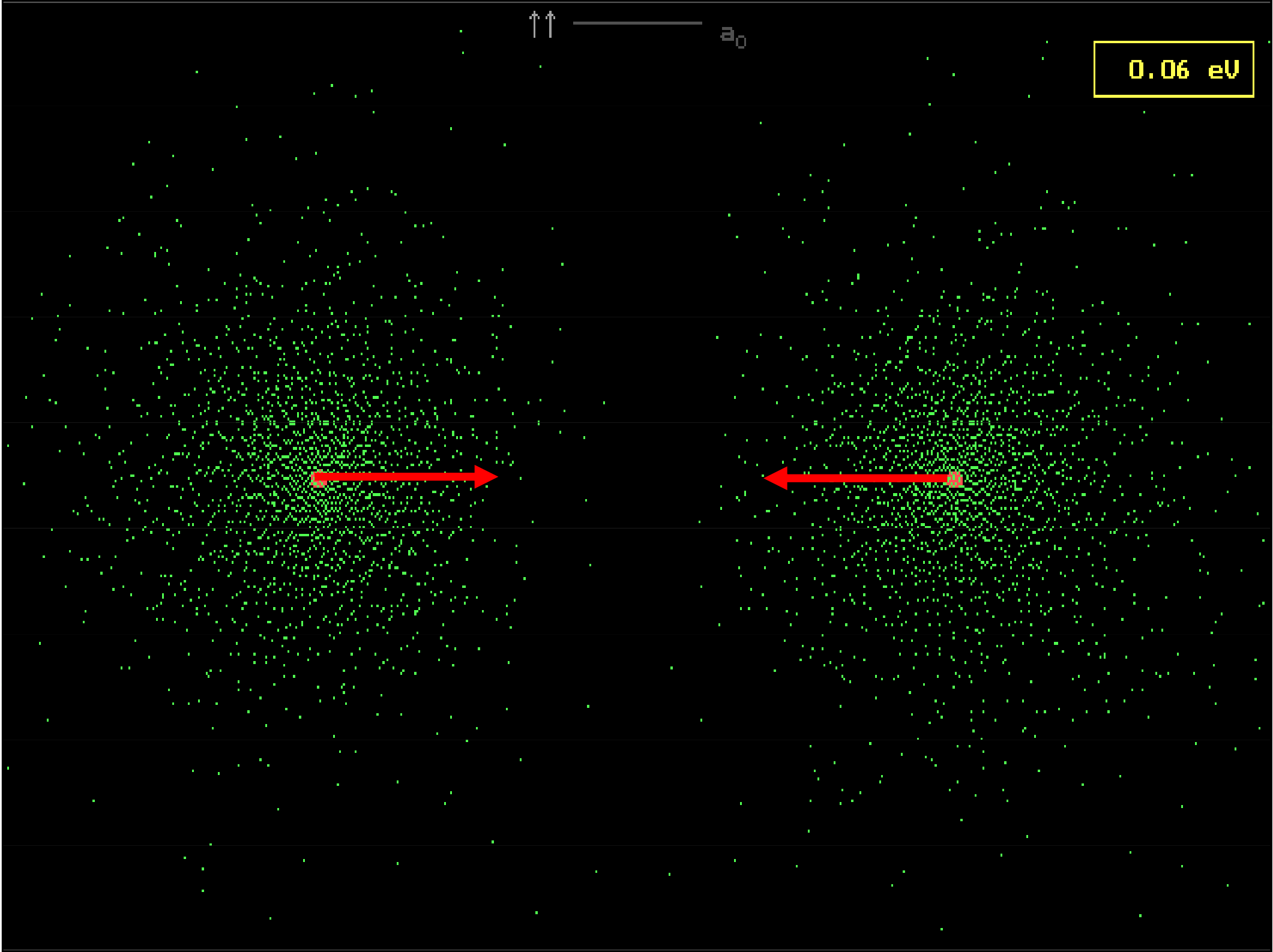
2) kovalentní (homeopolární) – H<sub>2</sub>

soustava 2 atomů vodíku s elektrony, jejich spiny jsou paralelní a antiparalelní



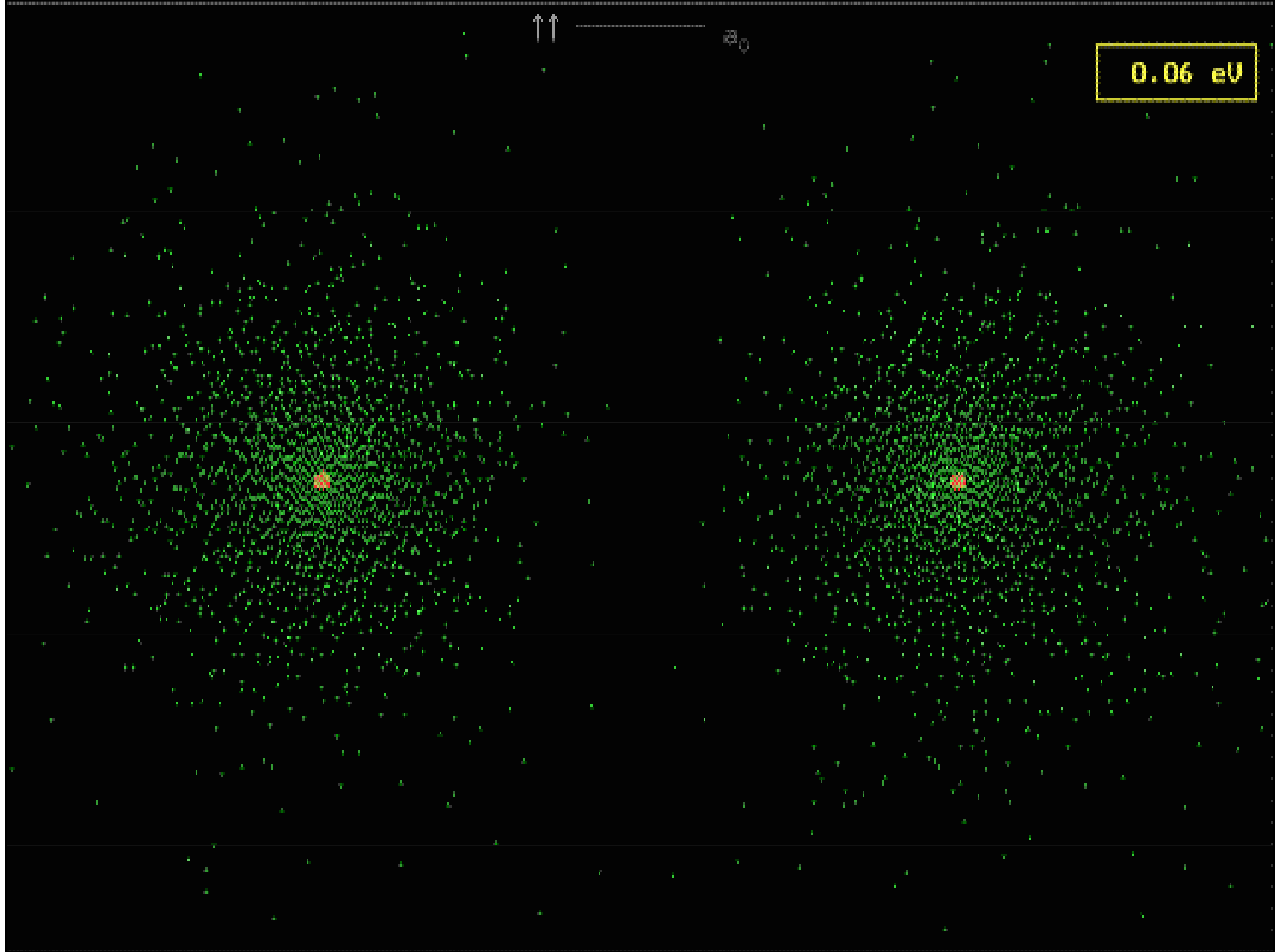
$\uparrow\uparrow$   $a_0$

0.06 eV



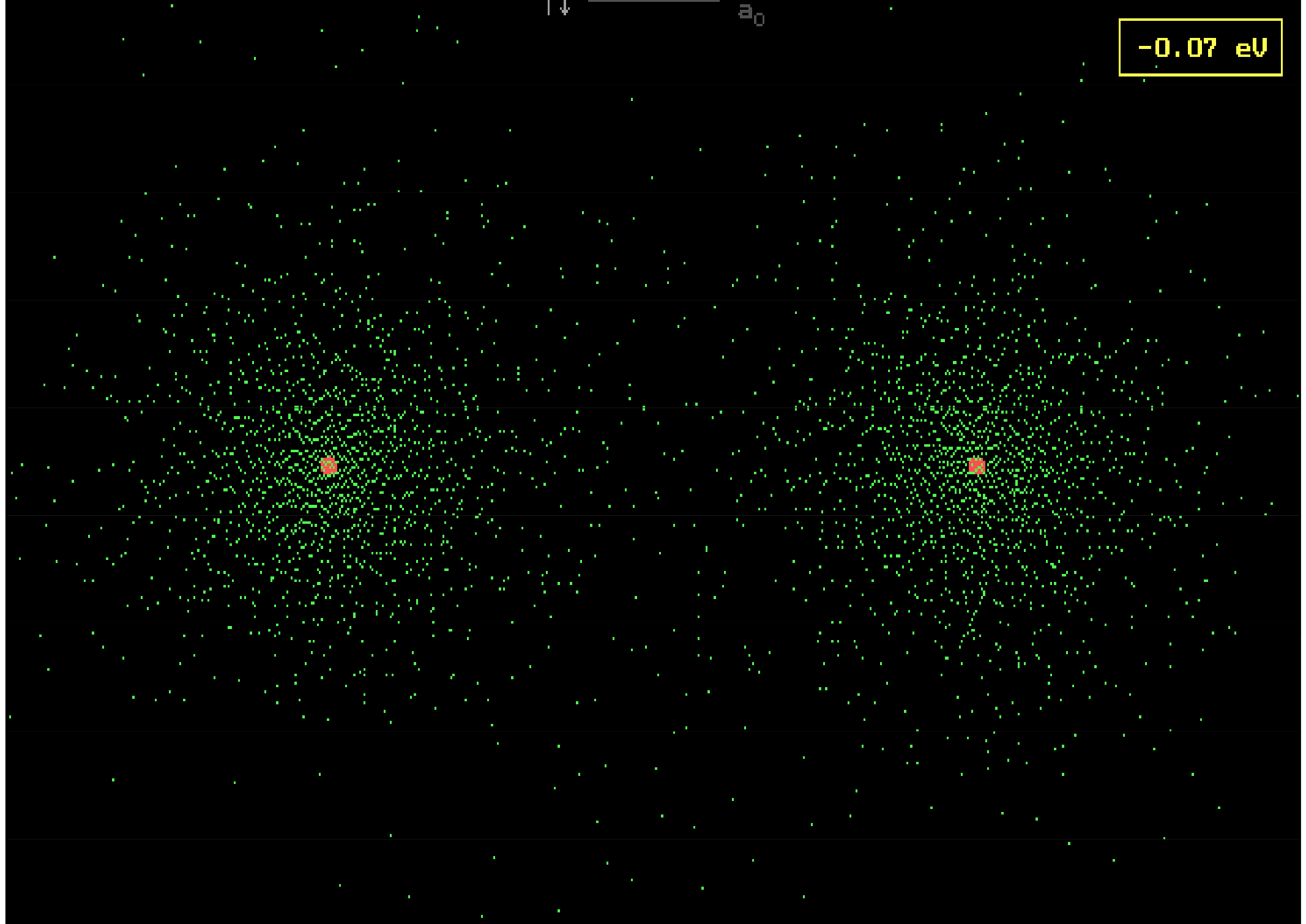
↑↑ -----  $\alpha_0$

0.06 eV



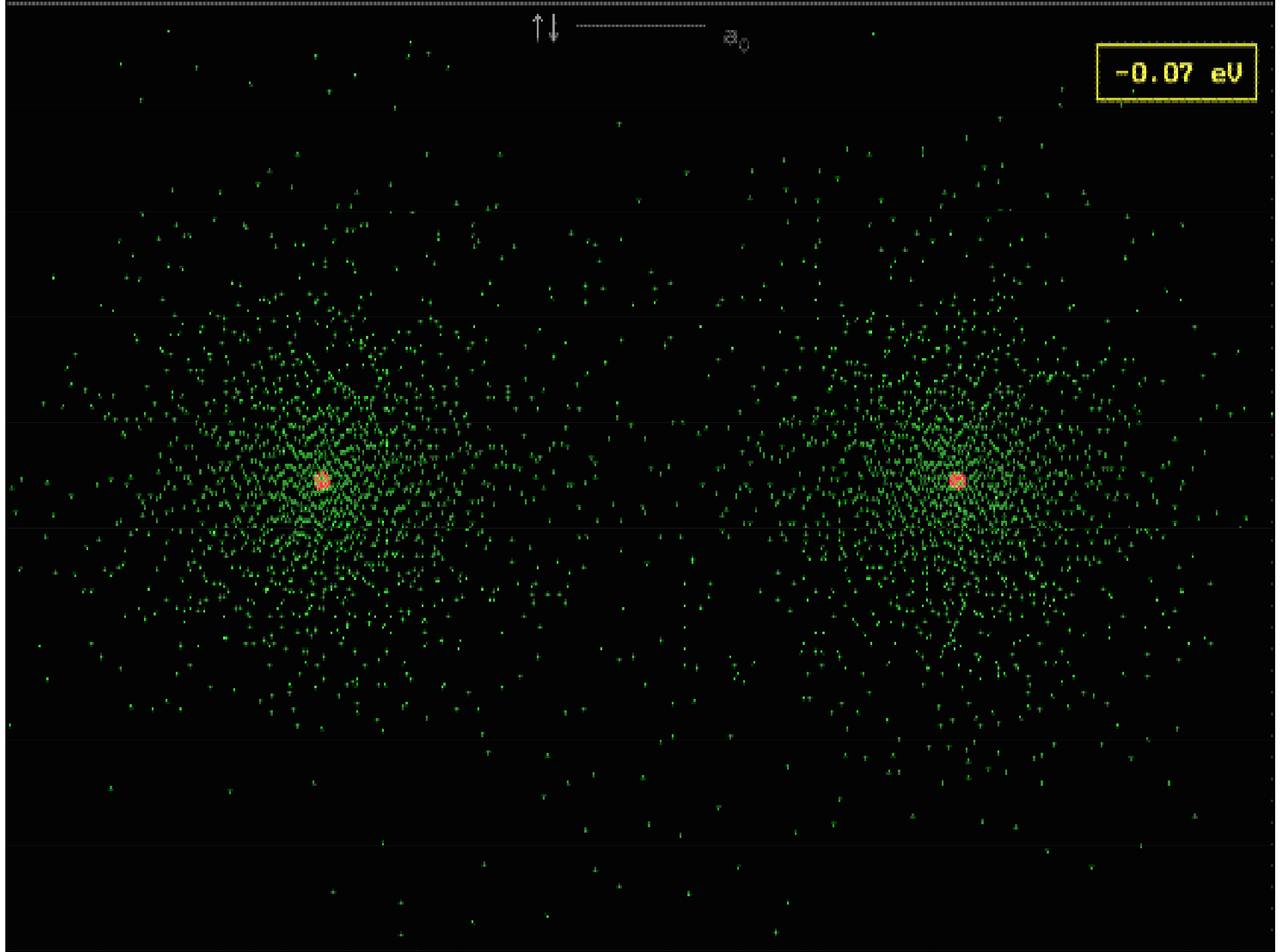
$\uparrow\downarrow$  —————  $a_0$

**-0.07 eV**



↑↓ —————  $\infty$

-0.07 eV



# 3. Spektra atomů

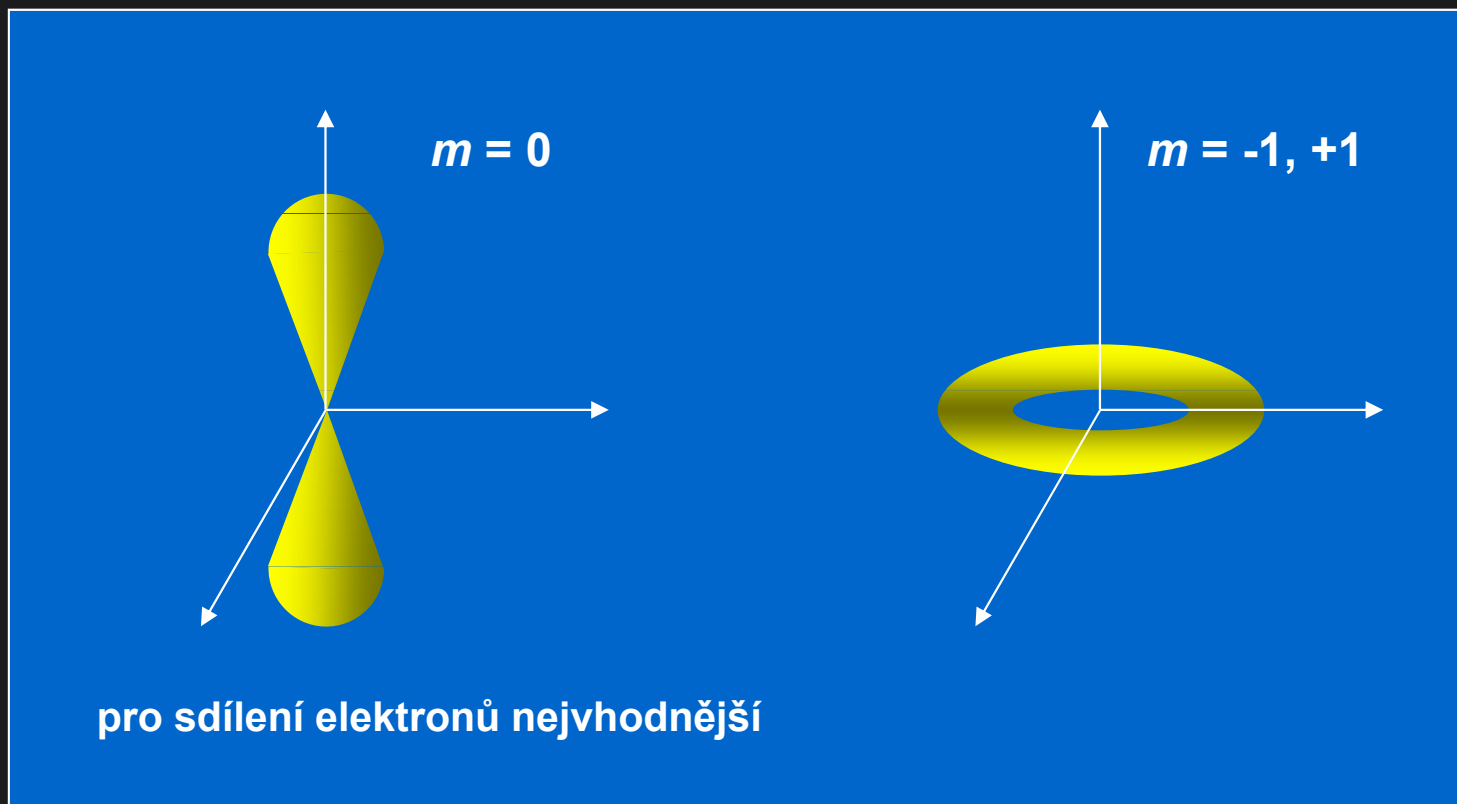
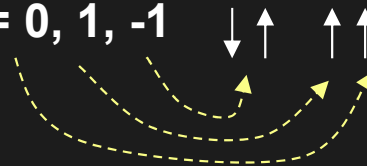
## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 1. Stavba molekul

stavba složitějších molekul – H<sub>2</sub>O

O – ve valenční slupce 6 elektronů: 2 ve stavu *s* (vykompenzovány, vazby se neúčastní)

4 ve stavu *p*:  $m = 0, 1, -1$

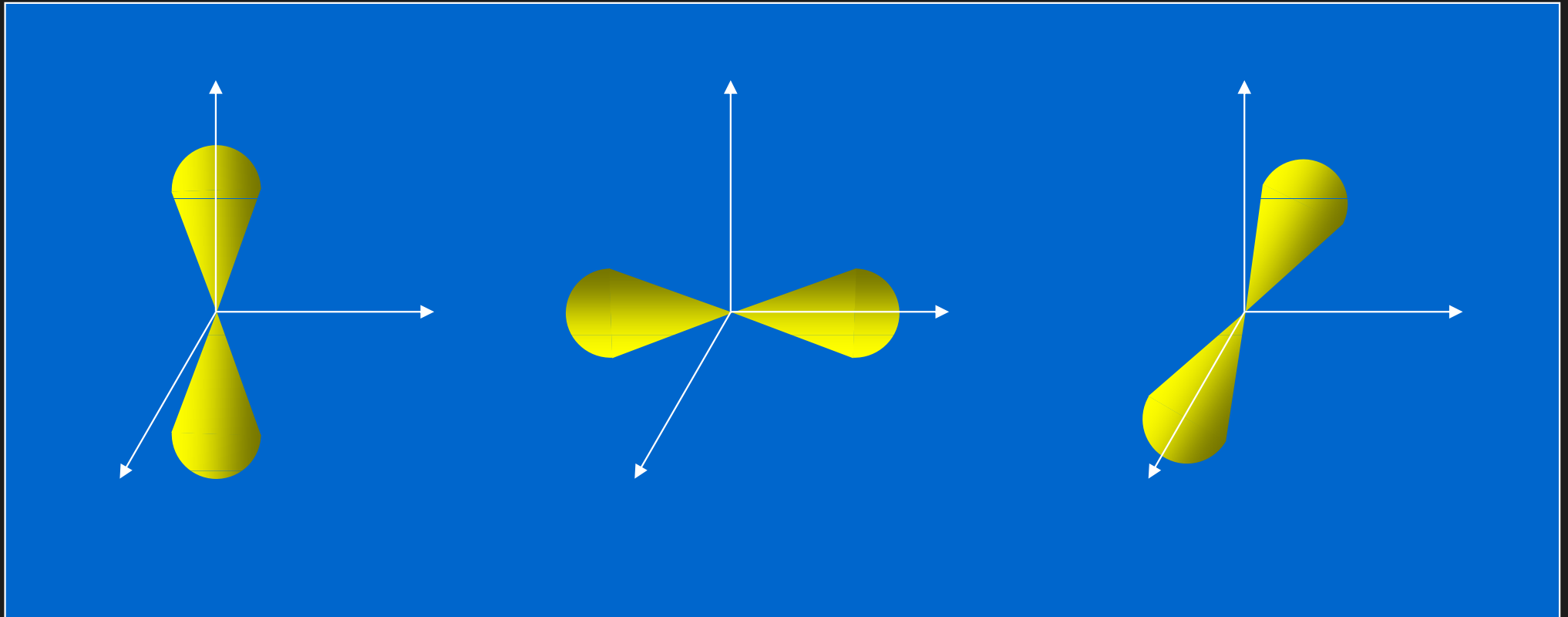


# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 1. Stavba molekul

Stavy všech 4  $p$  elektronů jsou různé, mají však prakticky stejnou energii. Kvantová mechanika pak umožňuje sestavit další vlnové funkce lineární kombinací všech 6 možných stavů. Hustoty pravděpodobnosti těchto 6 možných stavů pak mají tvar symetrický podle jednotlivých os:

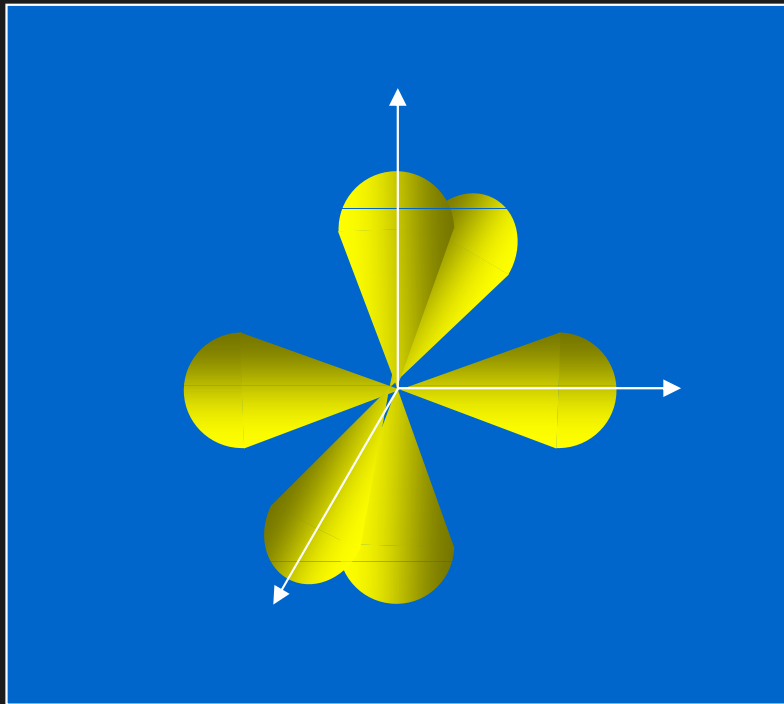


# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 1. Stavba molekul

Stavy všech 4 *p* elektronů jsou různé, mají však prakticky stejnou energii. Kvantová mechanika pak umožňuje sestavit další vlnové funkce lineární kombinací všech 6 možných stavů. Hustoty pravděpodobnosti těchto 6 možných stavů pak mají tvar symetrický podle jednotlivých os:



v jednom z rovnocenných „laloků“ musí být dva elektrony s opačnými spiny, ten se vazby neúčastní, ve zbylých lalocích je po jednom elektronu s totožnými spiny

atom vodíku má jediný elektron ve stavu *s*, které jsou kulově symetrické:



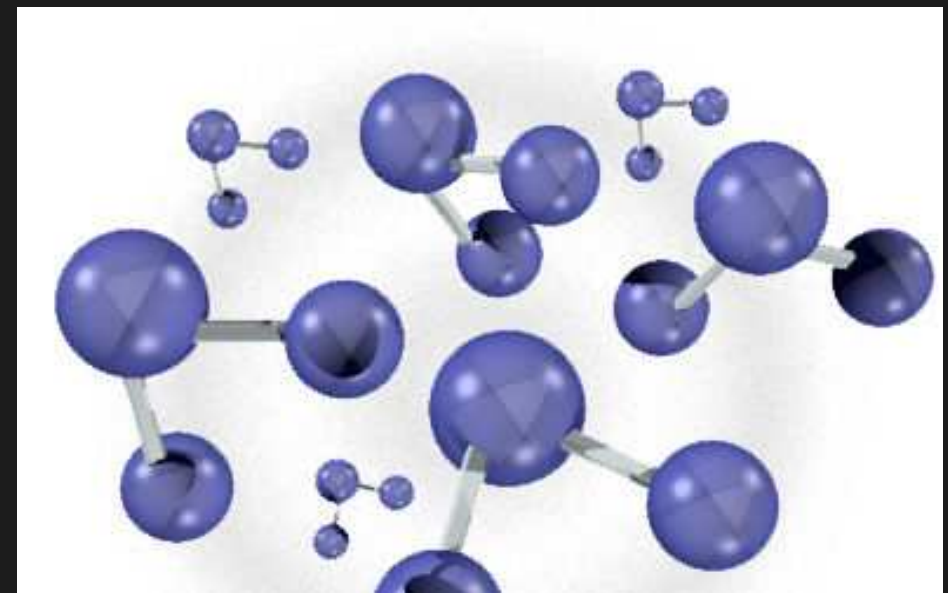
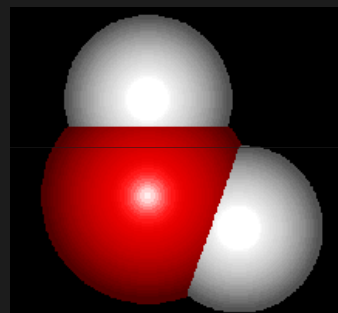
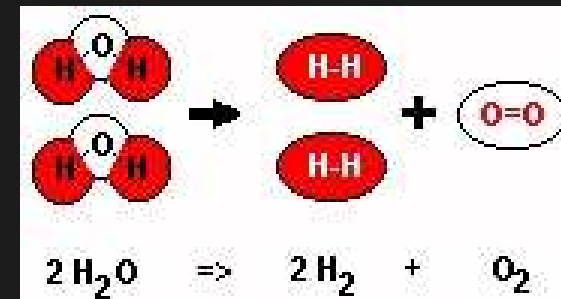
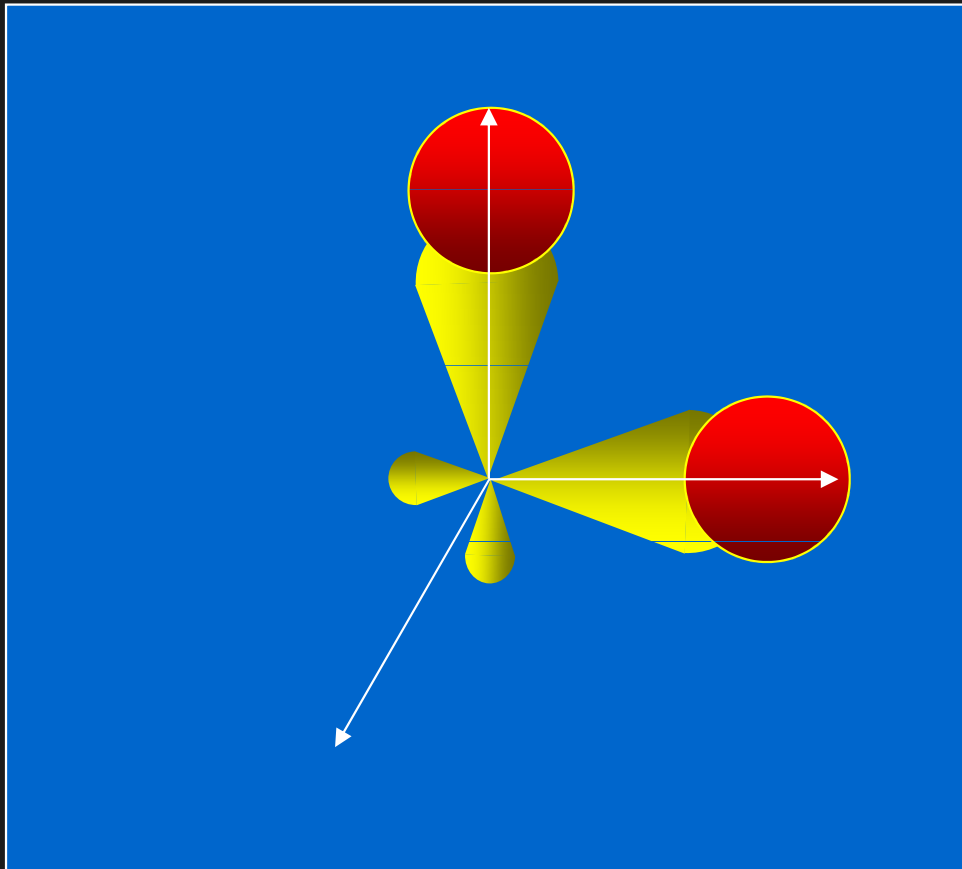
2 atomy vodíku se spiny elektronů opačnými, než mají 2 samotné valenční elektrony kyslíku se pak mohou vázat na atom kyslíku:

# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 1. Stavba molekul

atomy vodíku by měly svírat úhel  $90^\circ$ ,  
ve skutečnosti se elektrony se  
stejnými spiny 2 atomů vodíku  
odpuzují, proto skutečný úhel je  
 $104,5^\circ$





# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 1. Stavba molekul

molekula metanu:  $\text{CH}_4$ : uhlík v základním stavu 2mocný:  $2s: \downarrow\uparrow$   $2p: \uparrow\uparrow$

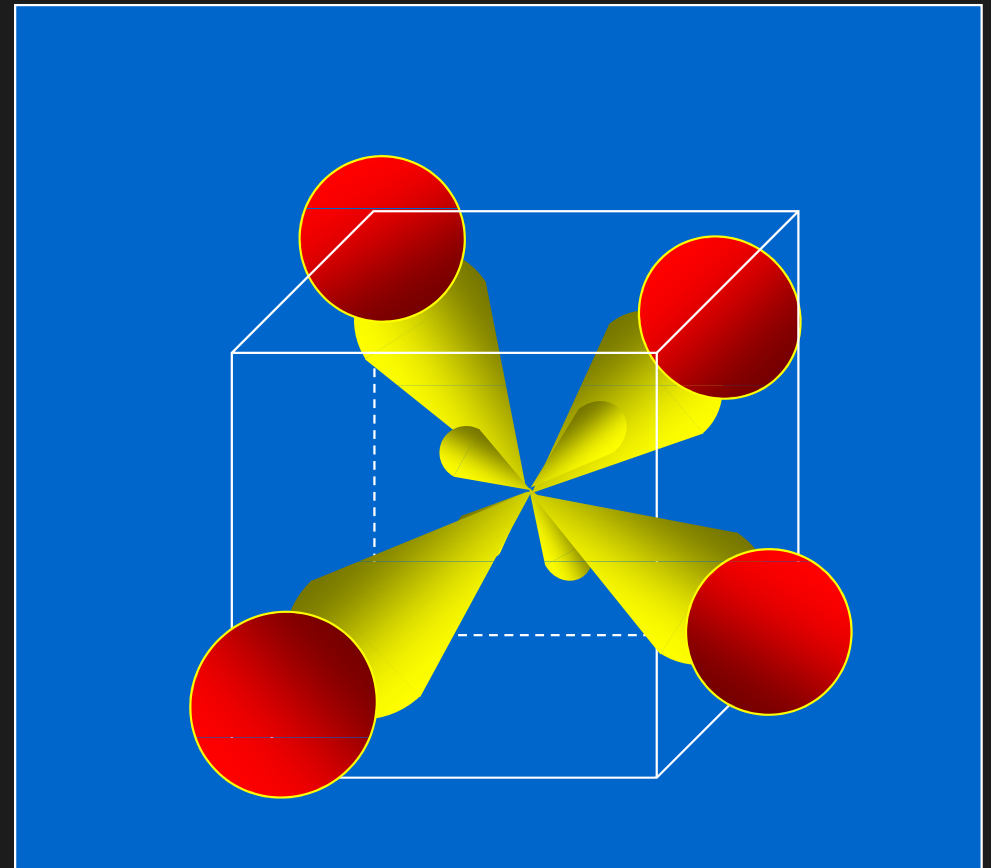
uhlík v excitovaném stavu 4mocný:  $2s: \uparrow$   $2p: \uparrow\uparrow\uparrow$ , jedna vazba by měla být odlišná

vysvětlení opět v kombinaci 4 vlnových funkcí, lineární kombinaci stavů různých orbitů nazýváme **hybridizací**

4 částečně obsazené orbity uhlíku míří do vrcholů pravidelného 4stěnu, k nim se vážou 4 atomy vodíku ( $sp^3$  hybridizace):

dosud popisované vazby souvisejí s prolínáním oblaků hustoty pravděpodobnosti, říkáme jim

**vazba  $\sigma$**  ( $s-p$ ,  $s-s$ ,  $p-p$ )

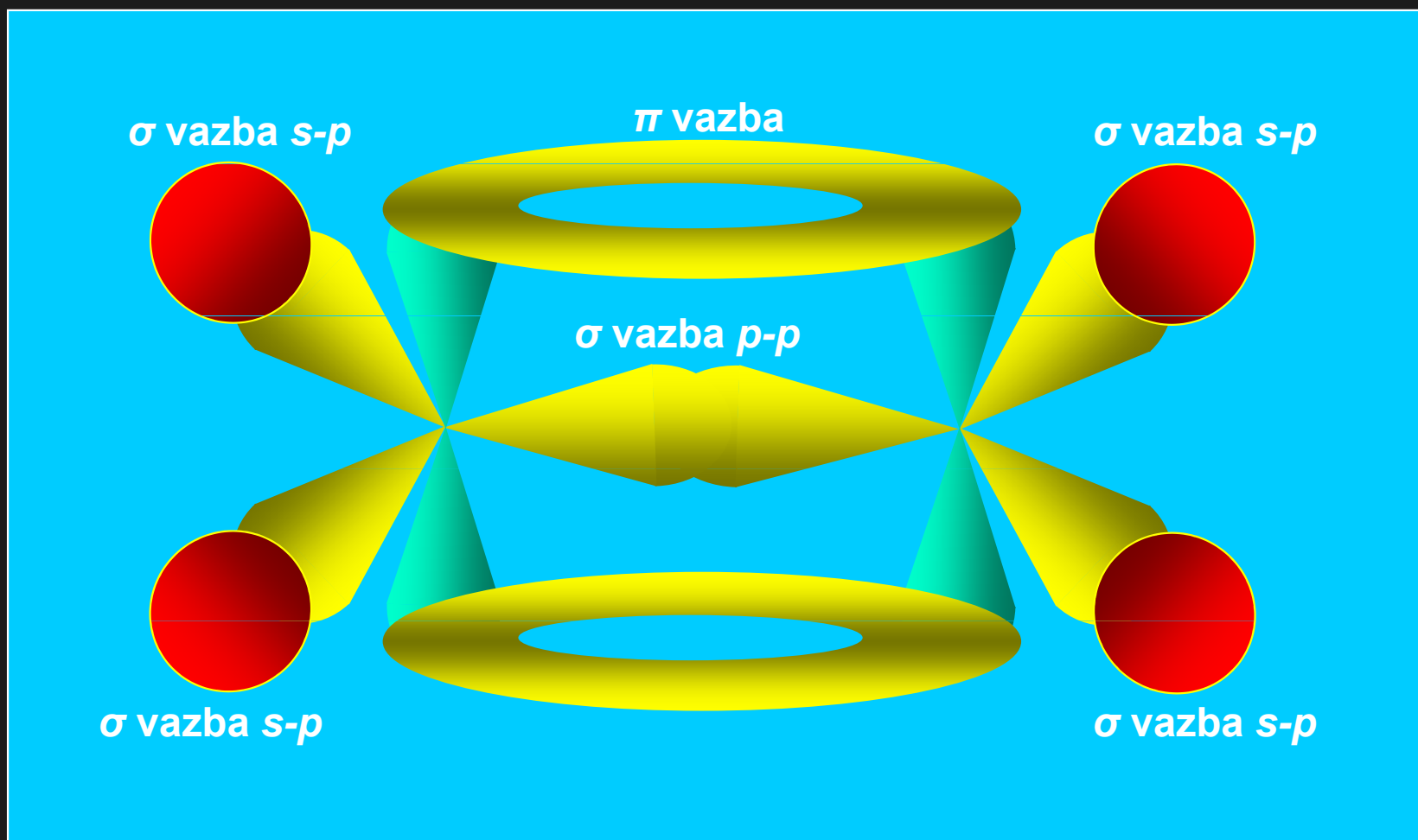


# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 1. Stavba molekul

etén:  $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ : příklad  $sp^2$  hybridizace a ukázka vzniku vazby  $\pi$

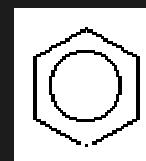
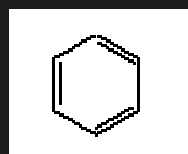
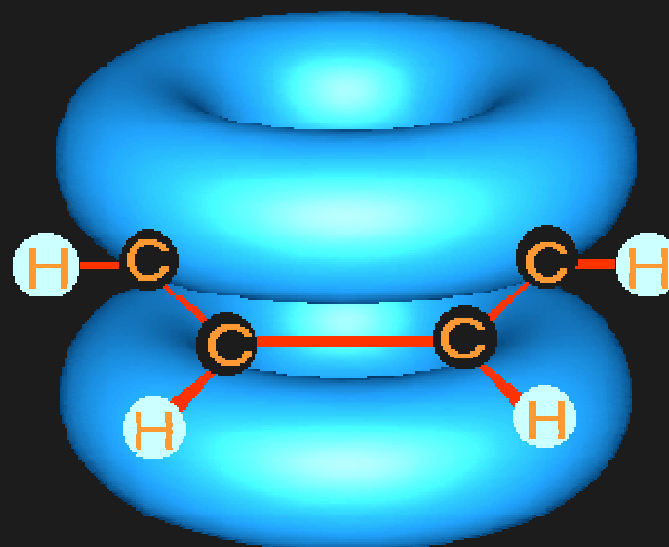
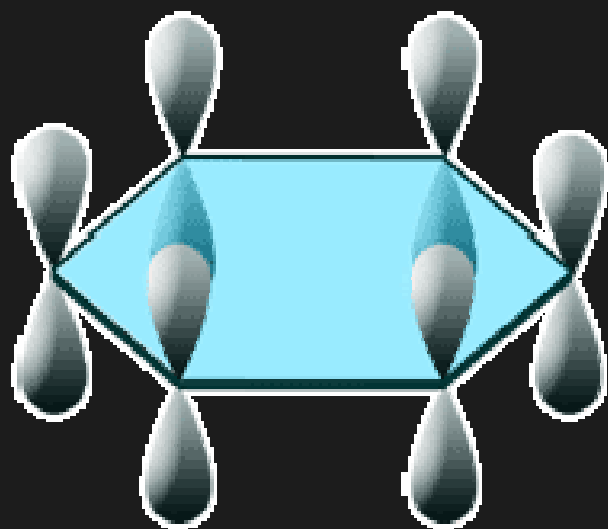


# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 1. Stavba molekul

benzen:  $sp^2$  hybridizace na  $\sigma$  vazby mezi atomy uhlíku a vazbu C-H, orbity  $p_z$  vytvoří celkovou vazbu  $\pi$  nad všemi atomy uhlíku



# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 2. Molekulová spektra

K dosavadní energii jednoatomové molekuly –  $E_c$  – energie elektronové konfigurace, která je mnohem složitější vlivem interakcí mezi elektrony jednotlivých atomů, se přičítají další 2 energie:

$E_r$  – energie rotace molekuly kolem osy procházející těžištěm,

$E_o$  – energie kmitání (oscilace)

$N$  atomů v molekule má  $3N$  stupňů volnosti:

3 pro translaci (souřadnice těžiště),

2-3 pro rotaci (lineární x nelineární molekula),

$3N - (5 \text{ nebo } 6)$  pro oscilace.

$$E = E_c + \left( \frac{1}{2} + \nu \right) \cdot \hbar \nu_\nu + \frac{\left( \sqrt{J(J+1)} \cdot \hbar \right)^2}{2I}$$

je zjednodušený vztah pro celkovou energii molekuly:

$\nu = 0, 1, 2, \dots$  je vibrační kvantové číslo,  $\nu_\nu$  je kmitočet vibrací,

$J = 0, 1, 2, \dots$  je vnitřní kvantové číslo celé molekuly.

# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 2. Molekulová spektra

z výpočtů:  $\Delta E_c \ll \Delta E_o \ll \Delta E_r$

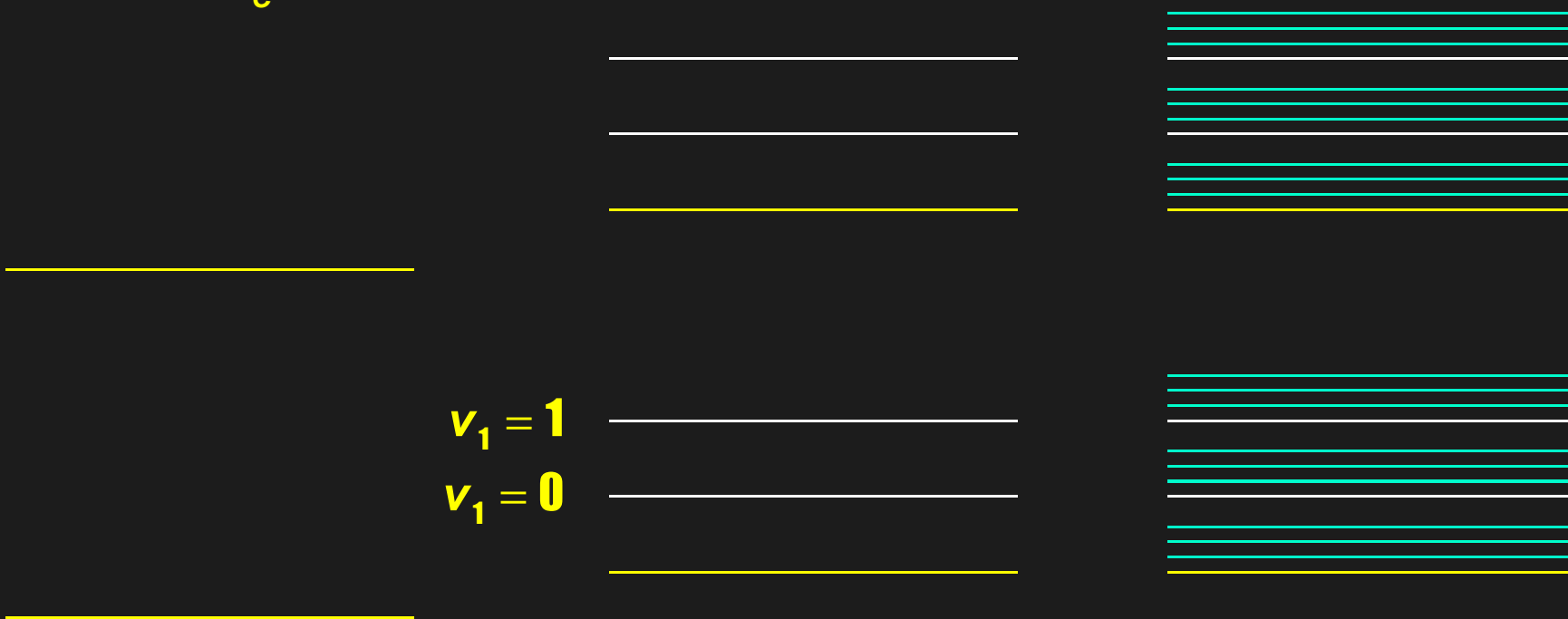
další komplikace:  $I$  (moment setrvačnosti) je závislý na kmitání,  
v není celočíselné, protože vazebné síly nejsou přesně elastické

vliv na hladiny:

$E_c$

$E_c + E_o$

$E_c + E_o + E_r$



**z jedné čáry vzniká molekulární pás čar**

# 3. Spektra atomů

## 3. 3. Molekuly – stavba a spektrum

### 3. 3. 2. Molekulová spektra

a) rotační pásy – vznikají přechody mezi různými rotačními stavy:  $E_c = \text{konst.}$   $E_o = \text{konst.}$

velmi malá energie, vlnové délky velmi vysoké (daleká IR oblast až radiové vlny:  
HCl 0,5 mm)

výběrové pravidlo  $\Delta J = \pm 1$

b) vibrační pásy – vzhledem k  $\Delta E_o \ll \Delta E_r$  jsou vždy doprovázeny rotačními přechody, proto někdy vibračně-rotační pásy, řídí se výběrovým pravidlem  $\Delta v = \pm 1$

c) elektronově-vibrační pásy – vzhledem k  $\Delta E_c \ll \Delta E_o \ll \Delta E_r$  jsou vždy doprovázeny vibračními i rotačními přechody, řídí se výběrovým pravidlem  $\Delta J = 0, \pm 1$   $J = 0 \not\rightarrow J = 0$

# 4. Atomové jádro

## 4. 1. Hmotnost atomových jader

Hmotnosti atomů jsou v poměru malých celých čísel, protože téměř celá hmotnost atomu je v jádře, musí být hmotnosti jader vyjádřitelné přibližně násobkem jisté malé hmotnosti.

atomová hmotnostní jednotka  $u = 1,660\,43 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \approx 931,478 \text{ MeV}$

z definice (1/12 hmotnosti neutrálního atomu uhlíku 12) vyplývá:

$$u = \frac{10^{-3}}{N_a} \quad N_a \text{ Avogadrovo číslo}$$

relativní atomová hmotnost:  $A_r = \frac{m_a}{u}$

nukleonové (hmotnostní) číslo:  $A = [A_r + 0,5]$  [ ] – celá část

označení konkrétního jádra (atomu):  ${}^A_Z X$

## 4. Atomové jádro

### 4. 1. Hmotnost atomových jader

#### měření hmotnosti atomů: **hmotnostní spektrografy**

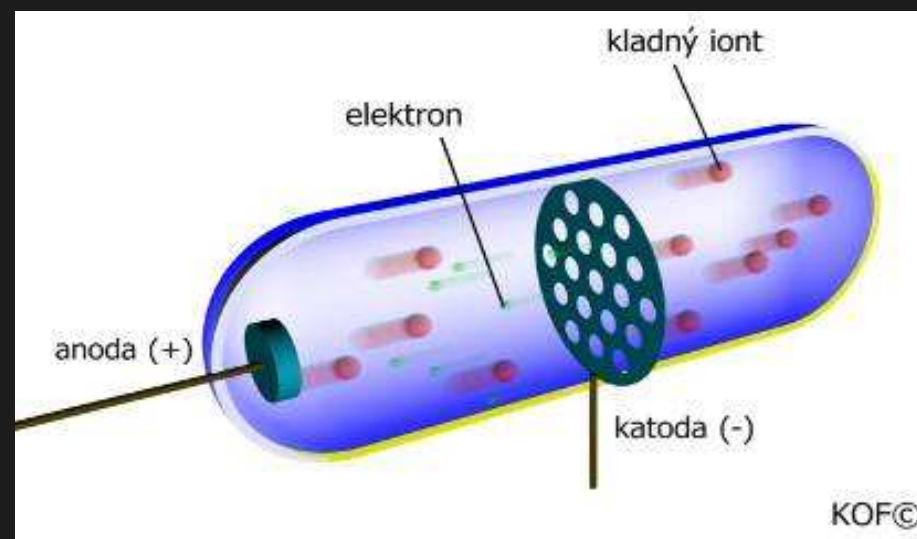
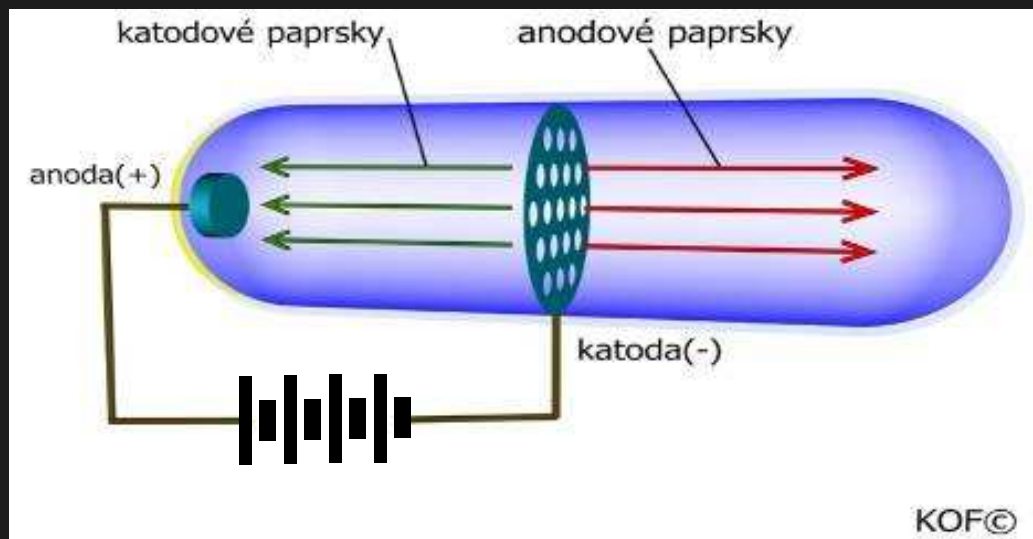
obecně vychází jejich princip z chování nabitě částice s hmotností  $m$  a s nábojem  $q$ , která se pohybuje v kombinaci elektrického a magnetického pole:

$$m\ddot{\vec{r}} = q \cdot \left\{ \vec{E} + \left[ \dot{\vec{r}} \times \vec{B} \right] \right\} \quad \vec{E} \text{ je intenzita elektrického pole}$$

$\vec{B}$  je magnetická indukce

trajektorie závisí na poměru  $\frac{q}{m}$  (specifickém náboji)

atomy je nutné ionizovat: ideálním zdrojem jsou anodové (kanálové) paprsky



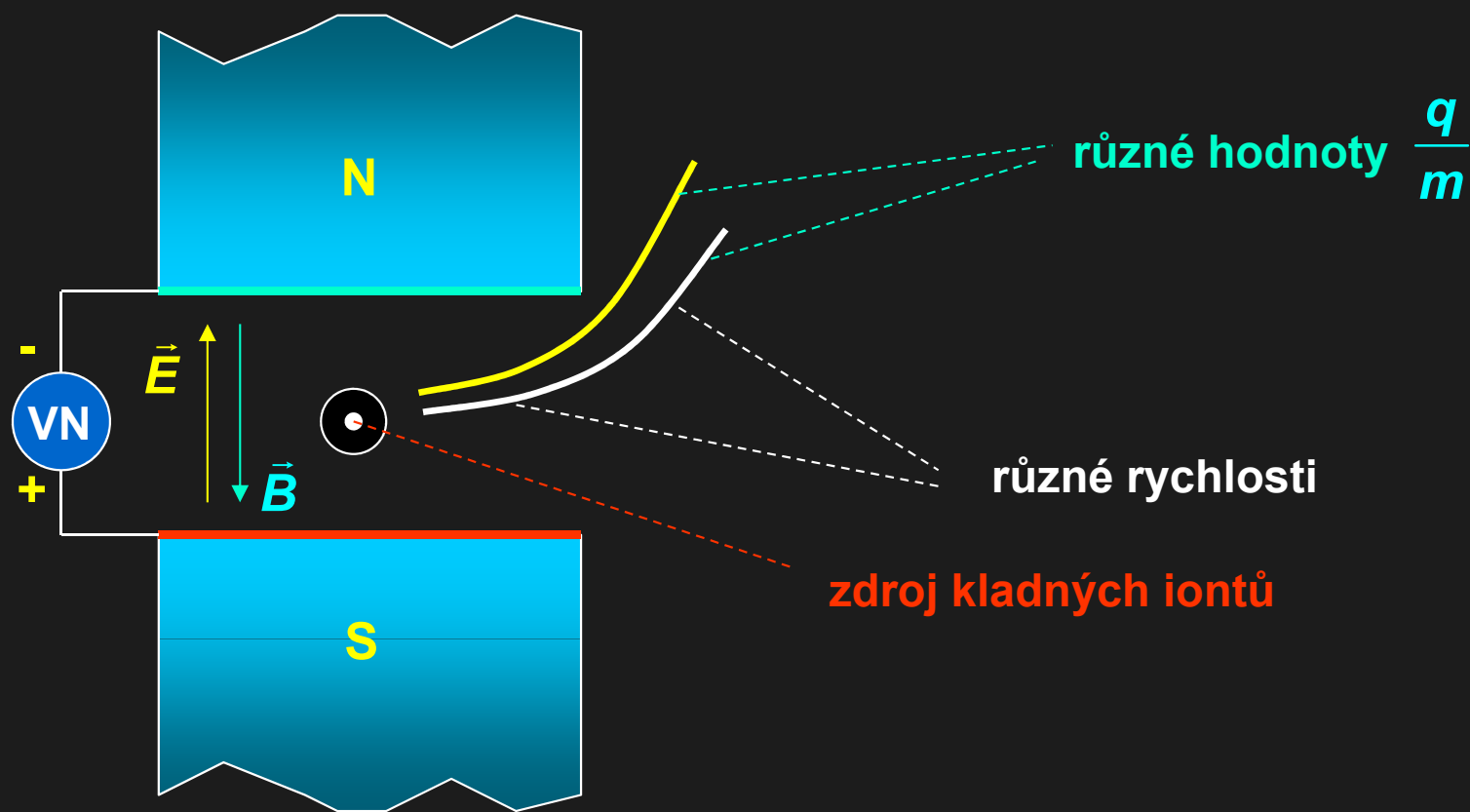


## 4. Atomové jádro

### 4. 1. Hmotnost atomových jader

# Thomsonův hmotnostní spektrograf

1913: příčné  $\vec{E}$  a příčné rovnoběžné  $\vec{B}$

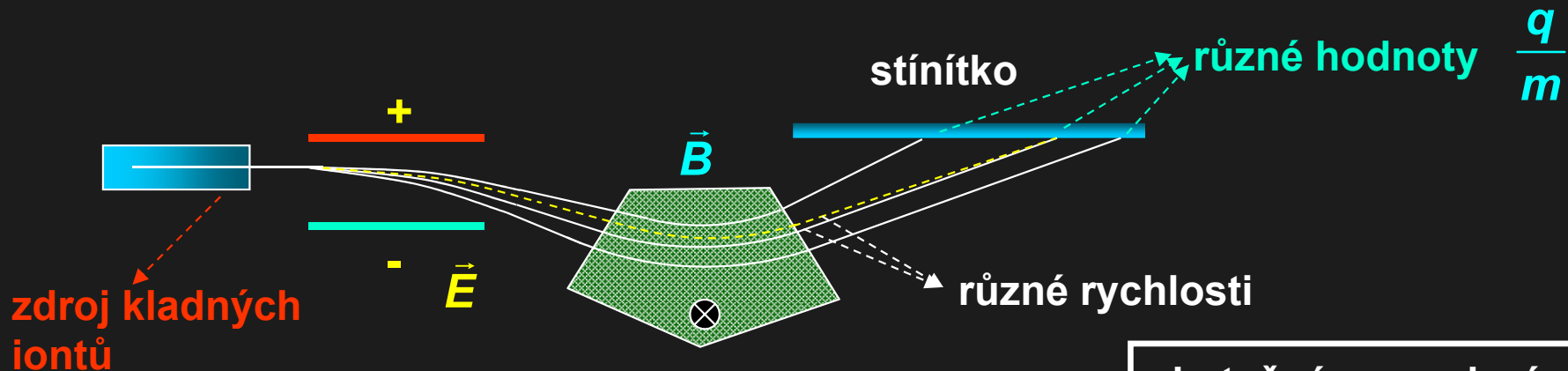


## 4. Atomové jádro

### 4. 1. Hmotnost atomových jader

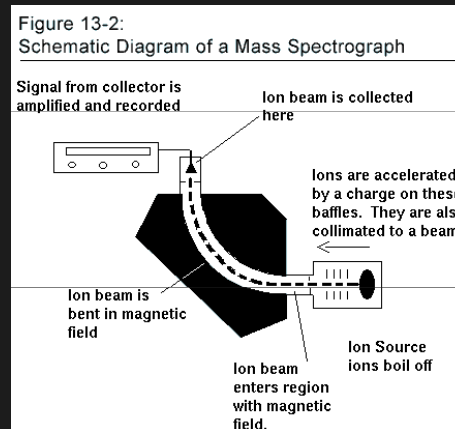
# Astonův hmotnostní spektrograf

1918: příčné  $\vec{E}$  a příčné kolmé  $\vec{B}$



zlepšení: místo dopadu nezávisí na rychlosti iontu (fokusace magnetickým polem)

skutečné provedení z roku 1919

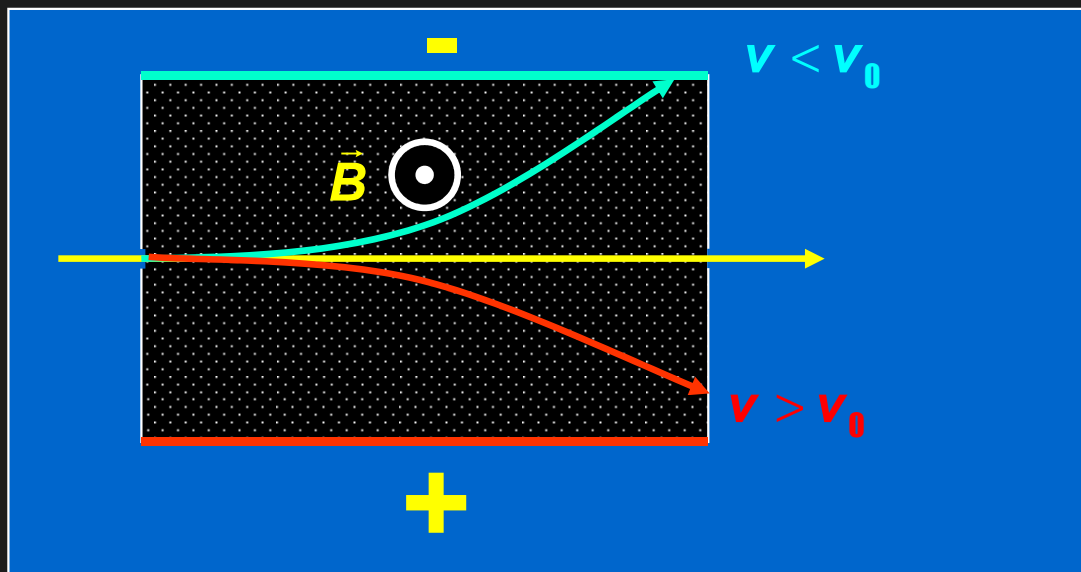


## 4. Atomové jádro

### 4. 1. Hmotnost atomových jader

# Bainbridgeův hmotnostní spektrograf

filtr rychlostí



$$q \cdot E - q \cdot v_0 \cdot B = 0$$

$$v_0 = \frac{E}{B}$$

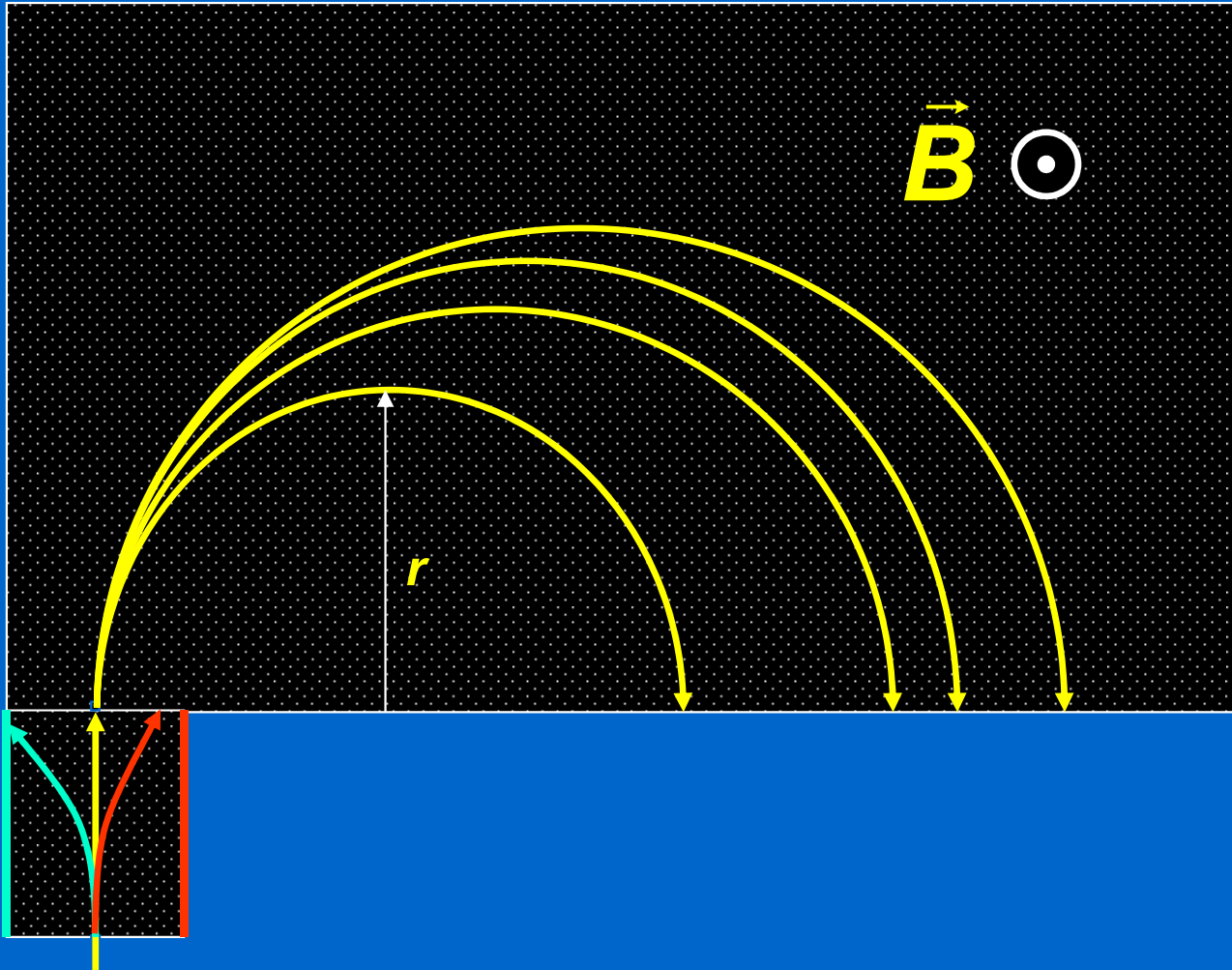
## 4. Atomové jádro

### 4. 1. Hmotnost atomových jader

magnetický  
analyzátor

$$\frac{mv_0^2}{r} = q \cdot v_0 \cdot B$$

$$r = \frac{mv_0}{qB}$$

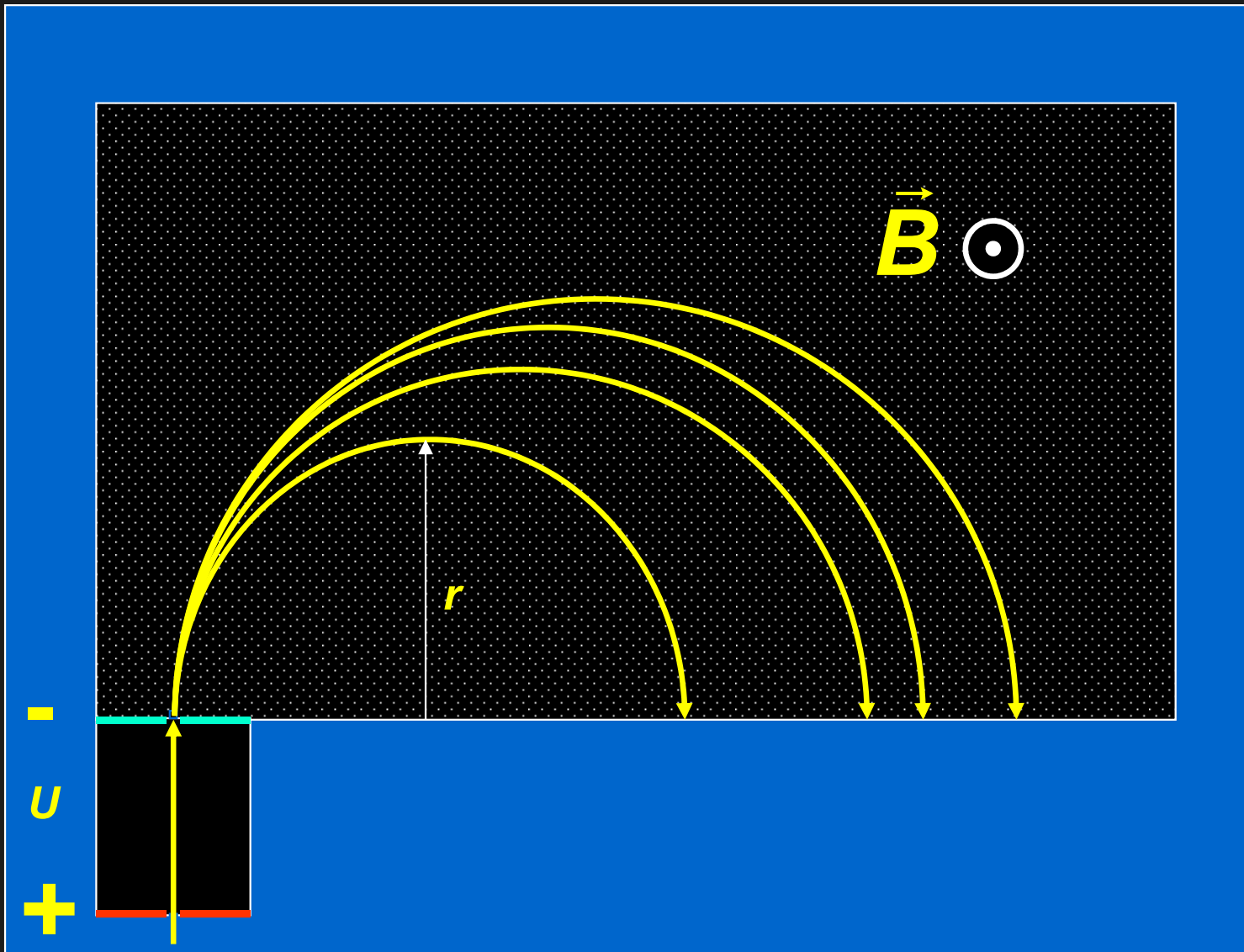


## 4. Atomové jádro

### 4. 1. Hmotnost atomových jader

# Bleakneyův hmotnostní spektrograf

filtr rychlostí – malá účinnost, zde se ionty získávají s nepatrnou energií a urychlují se:



$$\frac{mv^2}{2} = q \cdot U$$

$$\frac{mv^2}{r} = q \cdot v \cdot B$$

$$v = \frac{q \cdot r \cdot B}{m}$$

$$\frac{mr^2q^2B^2}{2m^2} = q \cdot U$$

$$\boxed{\frac{m}{q} = \frac{r^2B^2}{2U}}$$

separace izotopů

## 4. Atomové jádro

### 4. 2. Vývoj představ o složení jader

1896 Becquerel – radioaktivní záření – z některých atomů vycházejí elektrony s energiemi až 1 MeV, ty nemohou pocházet z obalu, musejí vycházet z jádra

1 hypotéza: jádro  ${}^A_ZX$  tvoří  $A$  protonů a  $A - Z$  elektronů:

$$\text{celkový náboj: } A \cdot e + (A - Z) \cdot (-e) = Ze$$

tato představa vede ke dvěma sporům:

Jádro  ${}^{14}_7N$  obsahuje podle hypotézy celkem 21 částic (14 protonů a 7 elektronů), všechny částice jsou fermiony, jádro by mělo být také fermionem a skupina jader by se měla řídit statistickým rozdělení Fermiho-Diracovým a podléhat Pauliho vylučovacímu principu.

z experimentů: jádro je bosonem – **dusíková katastrofa**

2. spor vyplývá z relací neurčitosti: má-li být elektron lokalizován v jádře s rozměrem  $10^{-15}$  m, musí být jeho neurčitost v hybnosti:

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \cong 5 \cdot 10^{-20} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} \quad \text{proto jeho energie může dosahovat:}$$

$$W_k = \sqrt{(\Delta p_x)^2 c^2 + W_0^2} - W_0 \cong 1,4 \cdot 10^{-11} \text{ J} = 100 \text{ MeV} \quad \text{z beta rozpadu však jen } \sim 1 \text{ MeV}$$

## 4. Atomové jádro

### 4. 2. Vývoj představ o složení jader

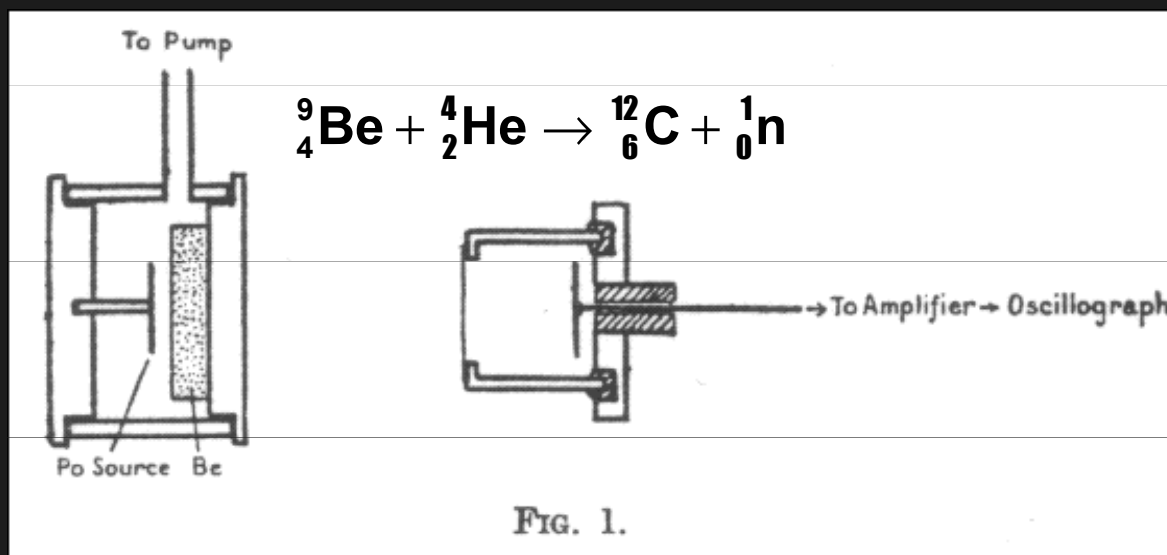
1931 – Ivaněnko a Heisenberg: teorie o neutronu



Werner Heisenberg (1901-1976)

1932 – experimentální důkaz:  
Chadwick

James Chadwick (1891-1974)



## 4. Atomové jádro

### 4. 2. Vývoj představ o složení jader

${}^A_ZX$  obsahuje Z protonů  $A - Z$  neutronů ( ${}^{14}_7N$  obsahuje tedy pouze 14 fermionů, proto je bosonem)

${}^A_ZX$  obecný název pro konkrétní hodnoty: **nuklid**

skupiny nuklidů se stejným Z: **izotopy** daného prvku

skupiny nuklidů se stejným A: **izobary**

skupiny nuklidů se stejným A - Z: **izotony**

částice	$m / u$	$mc^2 / \text{MeV}$	spin	doba života / s	mag. moment / $\mu_J$
proton	1,007 276 61	938,2796	$\frac{1}{2}$	$> 10^{-37}$	2,79
neutron	1,008 665 2	939,5731	$\frac{1}{2}$	$918 \pm 14$	1,91
elektron	$5,4893 \cdot 10^{-4}$	0,511004	$\frac{1}{2}$	stabilní	1836,5

$$\mu_J = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5,0505 \cdot 10^{-27} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$$

**jaderný magneton**



## 4. Atomové jádro

### 4. 3. Vazebná energie

$$B = Z \cdot m_H c^2 + (A - Z) m_n c^2 - m_J c^2$$

hmotnost atomu vodíku

hmotnost neutronu

hmotnost jádra

vazebné energie elektronů lze zanedbat ~ 1000 eV

$\frac{B}{A}$  vazebná energie na 1 nukleon

$\frac{B}{c^2}$  hmotnostní deficit

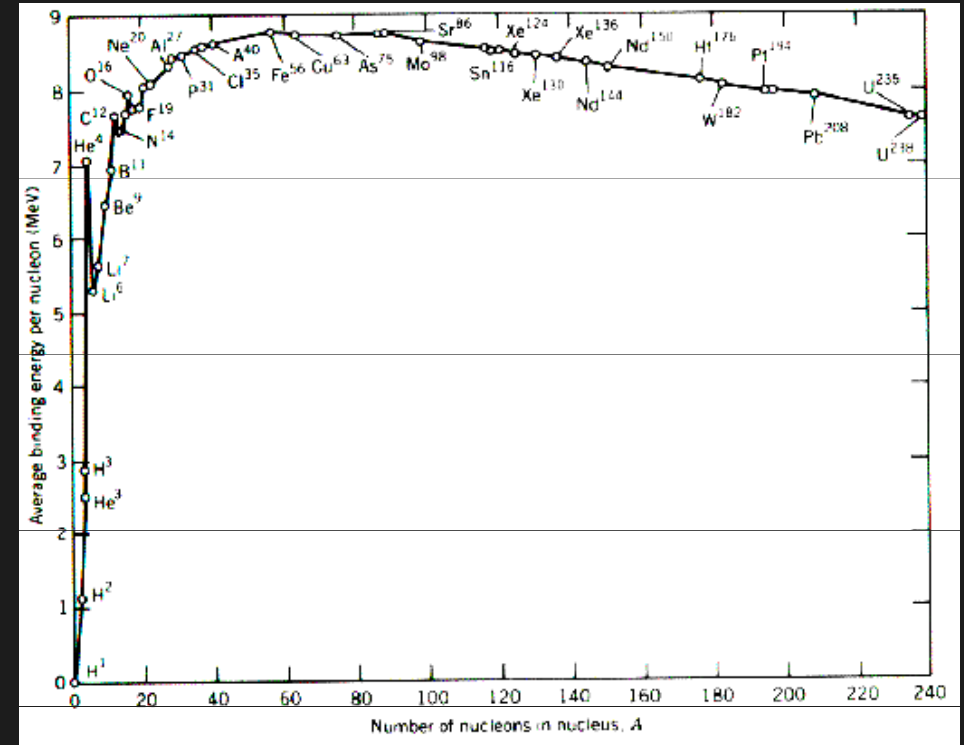
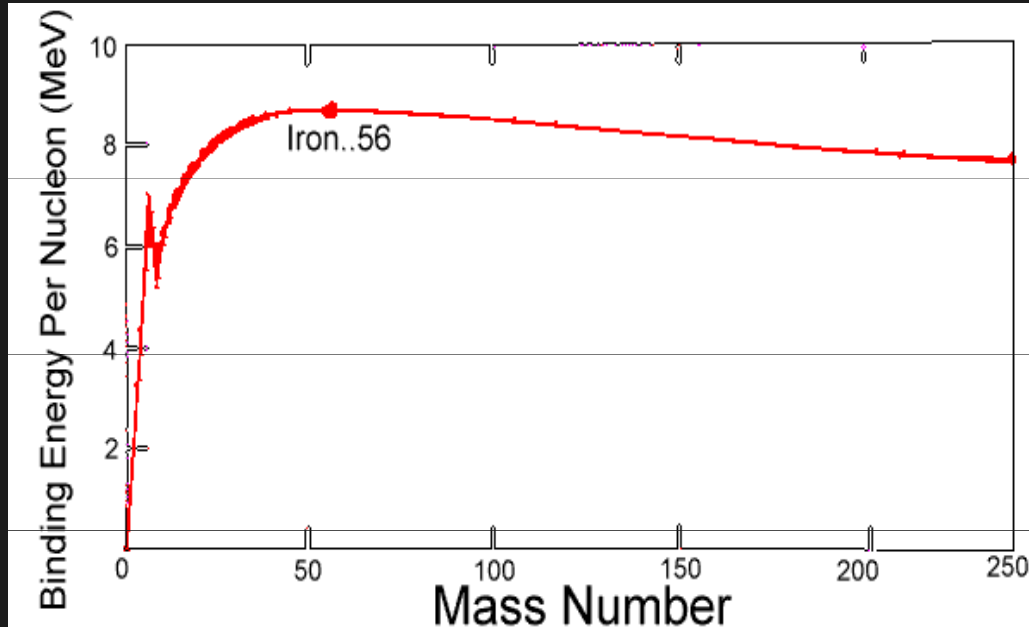
$\frac{B}{A}$  míra stability jádra (energie, kterou by bylo nutné vynaložit k rozložení jádra na jednotlivé nukleony)

síly způsobující přitažlivou interakci mezi nukleony: **jaderné síly** (jedny za 4 základních sil v přírodě)

kdyby měly jaderné síly stejný charakter jako síly gravitační, muselo by  $\frac{B}{A}$  lineárně vzrůstat s velikostí  $A$  (byly by nenasycené)

## 4. Atomové jádro

### 4. 3. Vazebná energie



nasycenost jaderných sil ~ omezený dosah

pokles pro velké  $A$ : vliv rostoucích odpudivých Coulombovských sil mezi protony

z grafu: dvě možnosti uvolňování jaderné energie: slučování (syntéza lehkých jader a štěpení těžkých jader)

nasycenost jaderných sil ~ nasycení kovalentní vazby, stejný charakter, tj. výměnné síly

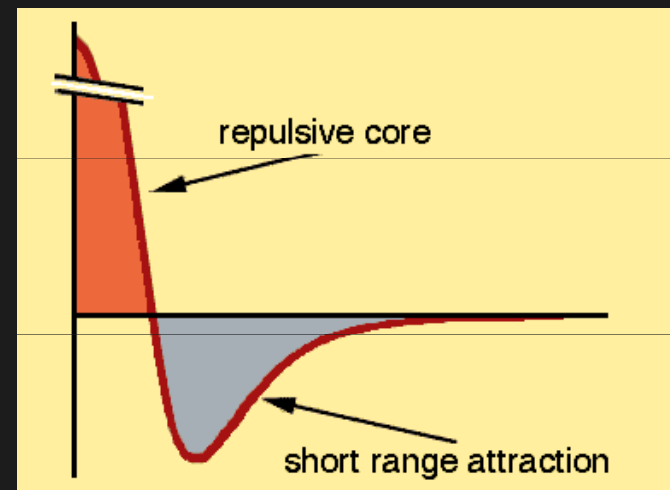
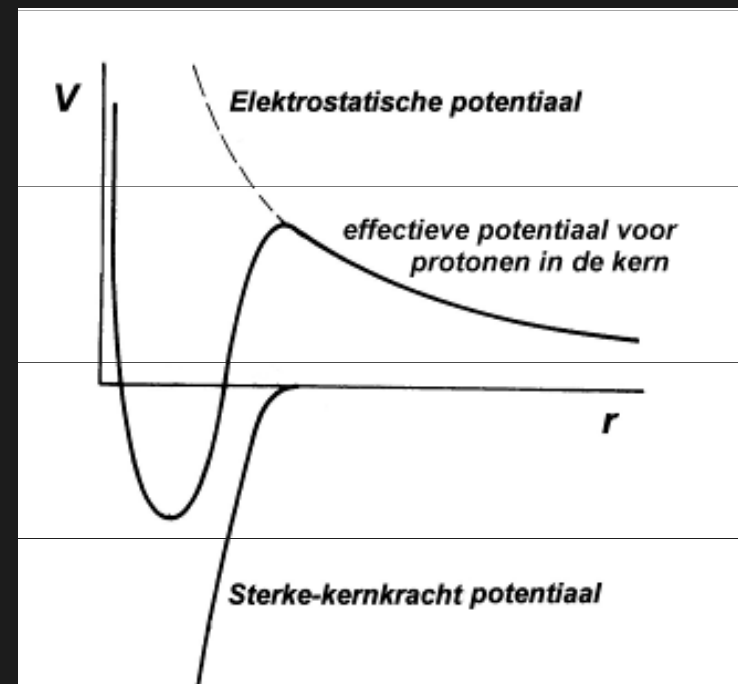
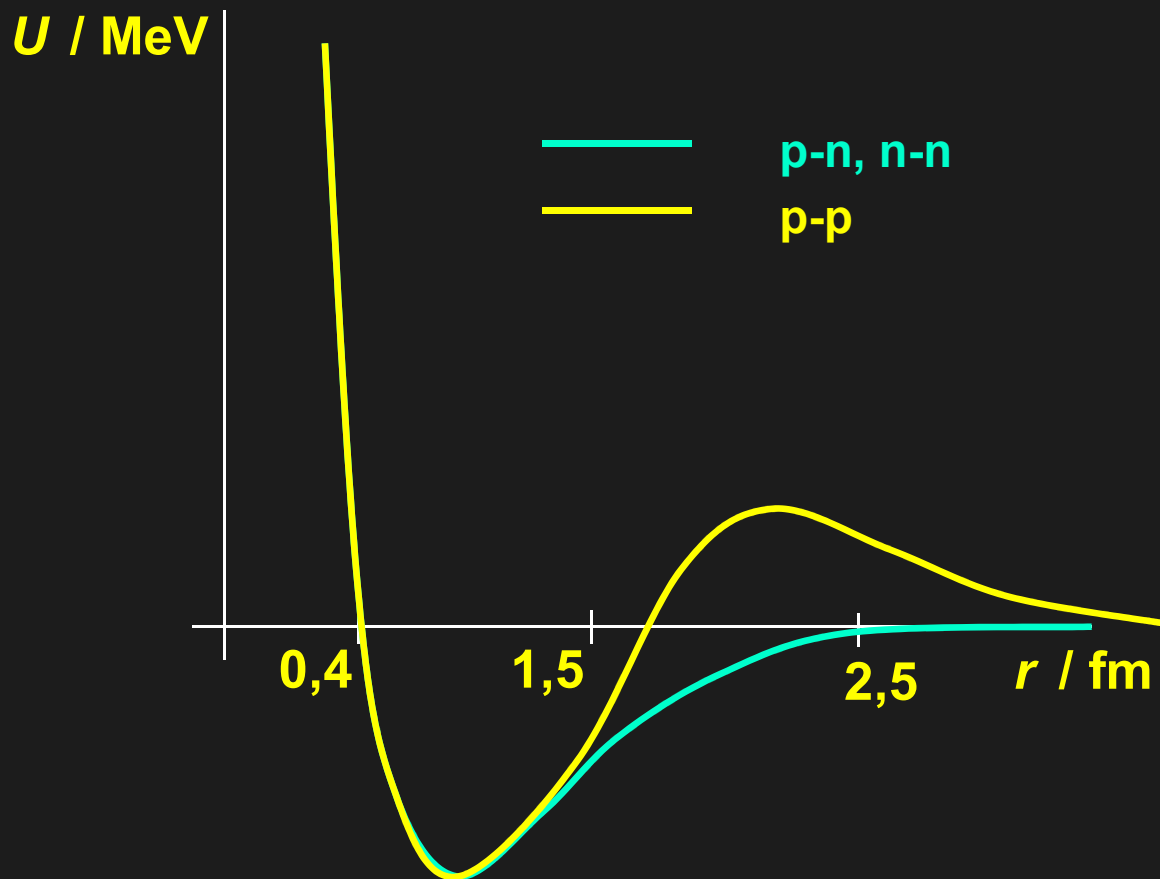
## 4. Atomové jádro

### 4. 4. Jaderné síly

anomální Rutherfordův rozptyl: u lehkých jader rozptylujícího prvku docházelo k změně energie částice alfa, z toho vyplynulo, že dosah jaderných sil, do jejichž vlivu se částice alfa dostala je menší než  $10^{-14}$  m

Základní vlastnosti jaderných sil:

#### 1. mají krátký dosah



## 4. Atomové jádro

### 4. 4. Jaderné síly

## 2. jsou nábojově nezávislé

## 3. dosahují nasycení

Vyplývá to jednak z grafu vazebné energie na jeden nukleon, jednak z krátkého dosahu: jeden nukleon se váže pouze s nukleony, které jsou v dosahu jaderných sil.

## 4. jsou spinově závislé

## 5. mají tenzorový charakter

Jaderné síly závisejí nejen na orientaci spinů nukleonů, ale i na úhly mezi těmito momenty hybnosti a jejich spojnicí.

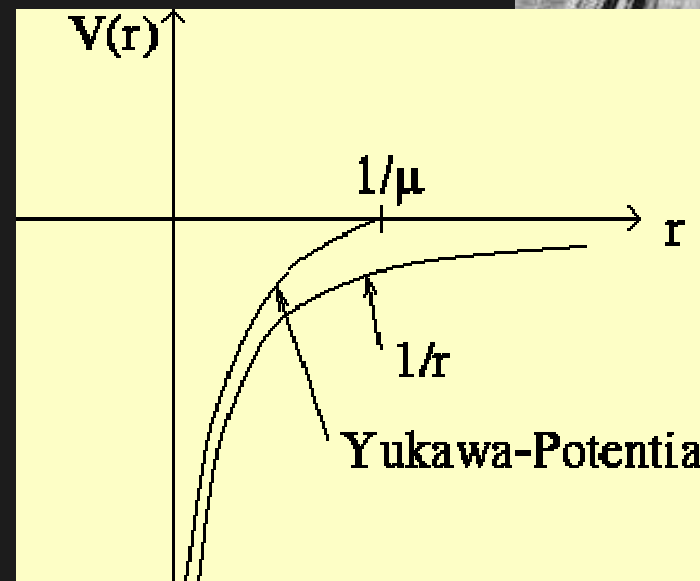
**Podstata jaderných sil: 1935 Yukawa**

$$U(r) = -g \frac{e^{-\alpha r}}{r}$$

$g$  je konstanta

$r$  je vzdálenost nukleonů

$\frac{1}{\alpha}$  je parametr s rozměrem délky



Hideki Yukawa (1907-1981)

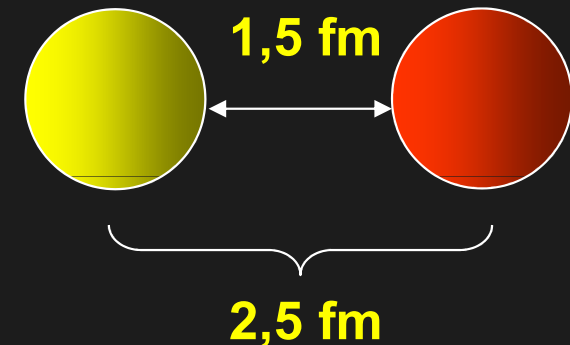
## 4. Atomové jádro

### 4. 4. Jaderné síly

vlastnosti jaderných sil naznačují, že jde o výměnné síly,  $\frac{1}{\alpha}$  je vlnová délka zprostředkující částice dělená  $2\pi$ :

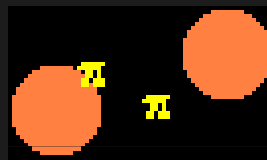
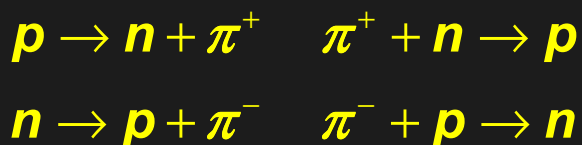
$$\frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{mc}$$

$$m = \frac{\hbar}{\frac{1}{\alpha} c} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{1,5 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^8} = 2,34 \cdot 10^{-28} \text{ kg} = 257 m_e$$



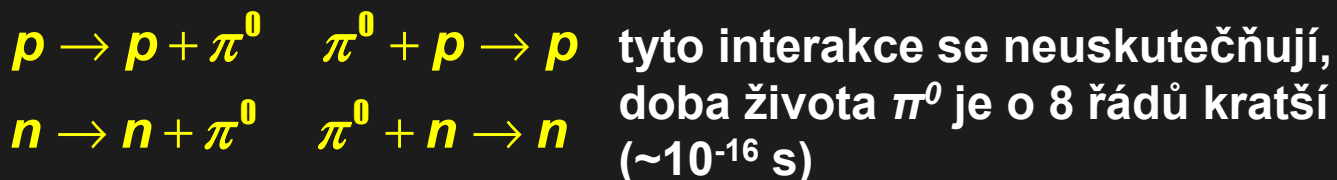
Zprostředkující částice má hmotnost mezi elektronem a nukleonem, Yukawa ji nazval **mezon**

experimentální objev těchto částic: 1947, protože bylo později objeveno více částic tohoto typu, dnes **mezon  $\pi$  (pion)**



výměna  
pionu

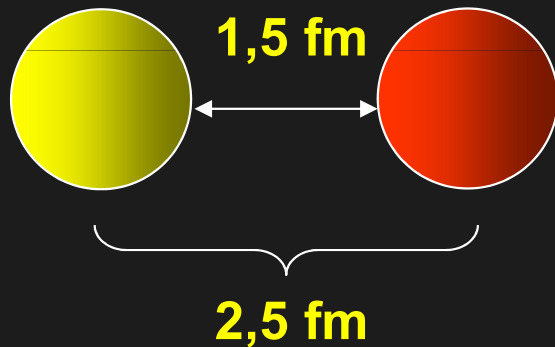
pionový  
„obal“  
protonu



## 4. Atomové jádro

### 4. 4. Jaderné síly

Odhad hmotnosti mezonu  $\pi$  je možné provést i na základě relací neurčitosti:



za předpokladu, že mezon přelétá maximální možnou rychlostí:  $\sim c$ , lze psát:

$$\Delta x = c \cdot \Delta t = 1,5 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad \Delta E \cdot \Delta t \cong \frac{\hbar}{2} \quad \Delta E = m_{\pi} \cdot c^2$$
$$m_{\pi} \cong \frac{\hbar}{2c \cdot (c \cdot \Delta t)} = \frac{\hbar}{2c \cdot \Delta x} = 1,2 \cdot 10^{-28} \text{ kg} = 118 m_e$$

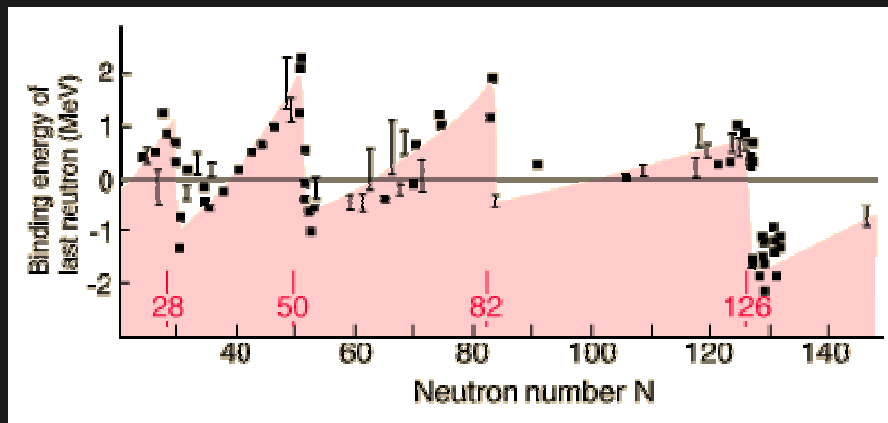
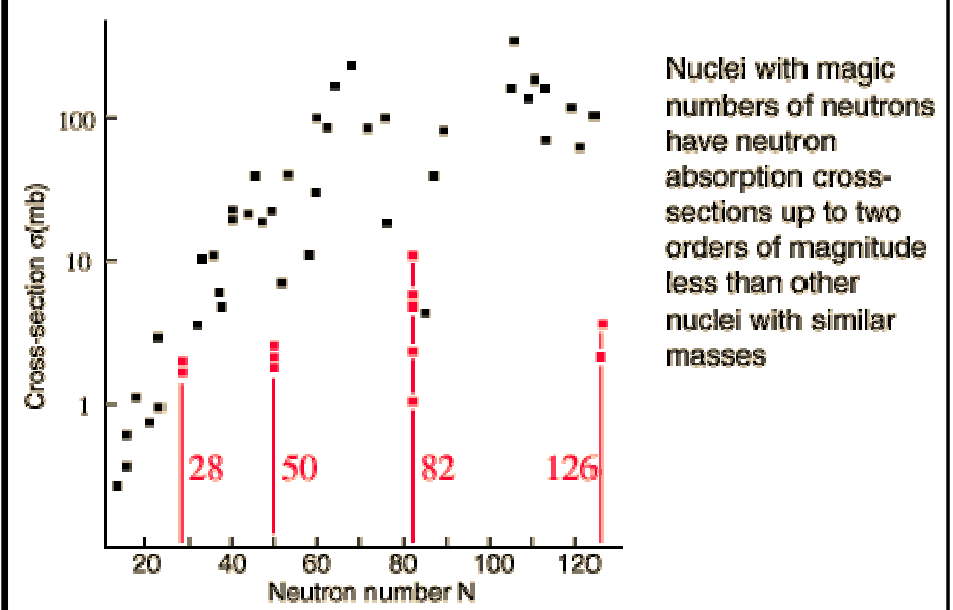
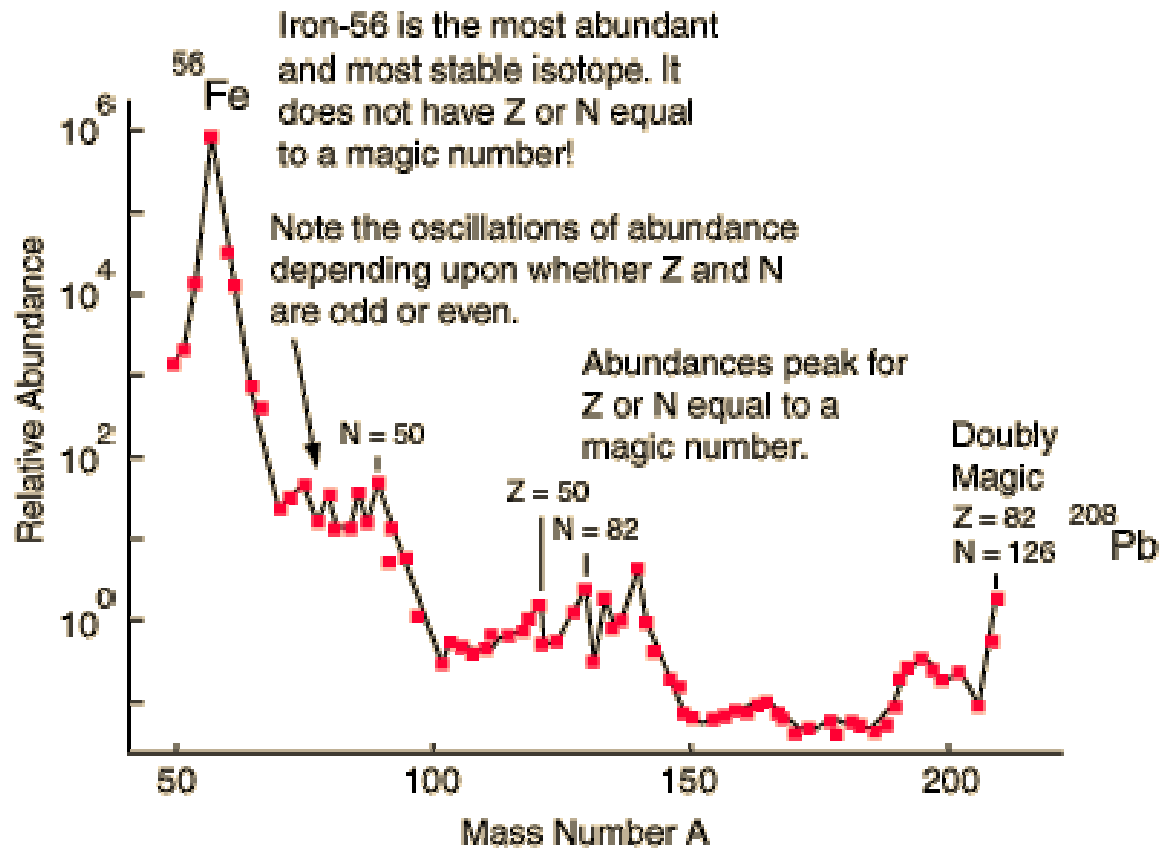
tj. polovina odhadu z Yukawovy vlnové délky. Skutečná hmotnost pionu je  $273 m_e$ .

Z interakcí vyplývá, že spin pionu je 0. Je to tedy boson.



# 4. Atomové jádro

## 4. 4. Jaderné síly





## 4. Atomové jádro

### 4. 5. Kapkový model jádra

z různých experimentů pro poloměr jádra:  $R = r_0 \cdot A^{\frac{1}{3}}$   $r_0 = 1,25 \cdot 10^{-15} \text{ m}$

Objem jádra je úměrný počtu nukleonů, nukleony se chovají jako nestlačitelné, jádro se chová jako kulová kapka nestlačitelné jaderné kapaliny.

Z této představy a dalších experimentů lze sestavit poloempirickou formuli pro výpočet hmotnosti jader (pro vazebnou energii):

a) Pro většinu jader platí, že  $\frac{B}{A}$  je zhruba konstantní,

proto můžeme vyjádřit v nejhrubším přiblížení:

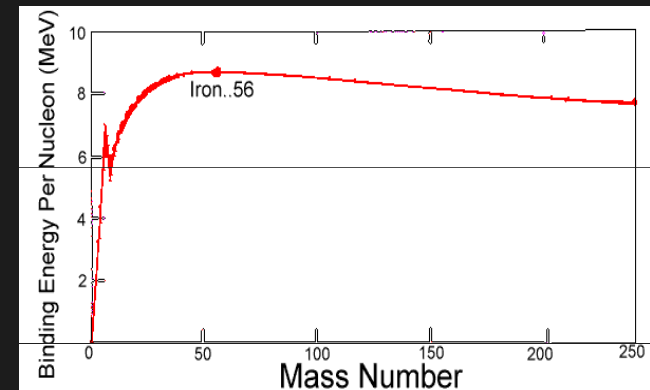
$$B_1 = a_v \cdot A, \quad a_v \text{ je konstanta objemové energie } B_1$$

b) Nukleony na povrchu „kapky“ se mohou vázat, jen s omezeným počtem dalších nukleonů, vazebná energie se snižuje:

$$B_2 = -a_s \cdot A^{\frac{2}{3}}, \quad a_s \text{ je konstanta povrchové energie } B_2$$

c) Vazebná energie se snižuje odpudivou Coulombovskou silou mezi protony:

$$B_3 = -a_c \cdot Z^2 A^{-\frac{1}{3}}, \quad a_c \text{ je konstanta Coulombovské energie } B_3$$



## 4. Atomové jádro

### 4. 5. Kapkový model jádra

d) Při malých hodnotách  $A$  je jádro nejstabilnější, je-li  $Z = A/2$

$$B_4 = -a_a \cdot \frac{\left(Z - \frac{A}{2}\right)^2}{A}, \quad a_a \text{ je konstanta asymetrické energie } B_4$$

e) Z hodnot separačních energií vyplývá, že nejstabilnější jádra mají sudý počet protonů a sudý počet neutronů – jsou **sudo-sudá**.

$$B_5 = \begin{cases} a_p \cdot A^{-\frac{1}{3}}, & \text{pro jádra ss} \\ 0, & \text{pro ls a sl jádra, } a_p \text{ je konstanta paritní energie } B_5 \\ -a_p \cdot A^{-\frac{1}{3}}, & \text{pro jádra ll} \end{cases}$$

Poznámka: existují jen 4 stabilní **lichó-lichá** jádra:  ${}^2_1\text{H}$ ,  ${}^6_3\text{Li}$ ,  ${}^{10}_5\text{B}$ ,  ${}^{14}_7\text{N}$

Vazebná energie jádra:  $B = \sum_{i=1}^5 B_i$

Hmotnost jádra:

$$m(Z, A) = Zm_H + (A - Z)m_n + \frac{1}{c^2} \left[ -a_V A + a_S A^{\frac{2}{3}} + a_C \cdot Z^2 A^{-\frac{1}{3}} + a_a \frac{\left(Z - \frac{A}{2}\right)^2}{A} - B_5 \right]$$

## 4. Atomové jádro

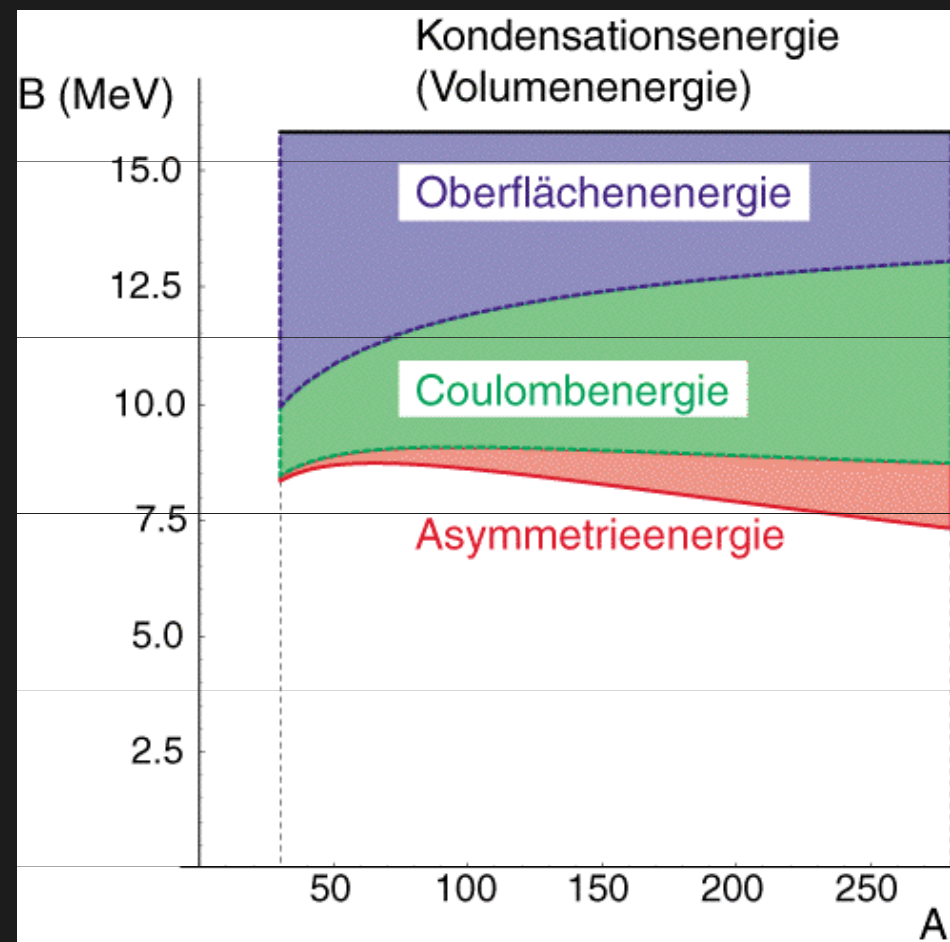
### 4. 5. Kapkový model jádra

poslední vztah je tzv. Weizsäckerova formule pro výpočet hmotnosti jader. Pro  $A > 30$  je přesnost lepší než 1 %



Carl-Friedrich von Weizsäcker (1912-)

$$a_v = 15,75 \text{ MeV}, a_s = 17,8 \text{ MeV},$$
$$a_c = 0,711 \text{ MeV}, a_a = 93,2 \text{ MeV},$$
$$a_p = 11,2 \text{ MeV},$$



## 4. Atomové jádro

### 4. 6. Moment hybnosti atomového jádra

O existenci svědčí velmi jemná struktura spektrálních čar (hyperjemná), vznikající interakcí magnetických momentů elektronu v obalu s magnetickým momentem jádra.

Vzhledem ke kvantovému charakteru stavu elektronů je opět moment hybnosti jádra dán kombinací dílčích orbitálních momentů hybnosti  $\vec{l}_i$  jehož průmět je vždy celočíselným násobkem  $\hbar$  a spinovým momentem hybnosti  $\vec{s}_i$ , jehož průmět je vždy poločíselný (nukleony jsou fermiony).

Celkový moment hybnosti  $i$ -tého nukleonu:  $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$

Celkový moment hybnosti jádra:  $\vec{J} = \sum_{i=1}^A \vec{l}_i + \vec{s}_i$

Tento moment hybnosti musí být kvantován podle obecných vztahů:

$$|\vec{J}|^2 = I \cdot (I + 1) \hbar^2 \quad J_z = m_I \hbar \quad m_I = -I, -I + 1, \dots, I - 1, I$$

$$I \begin{cases} 0, 1, 2, 3, \dots & \text{pro licho-lichá járda} \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots & \text{pro s-l a l-s járda} \\ 0 & \text{pro sudo-sudá járda} \end{cases}$$

Číslo  $I$  se říká spin jádra.

## 4. Atomové jádro

### 4. 7. Magnetický moment jádra

Moment hybnosti + náboj  $\Rightarrow$  magnetický moment jádra.

$$\vec{\mu} = g\mu_j\vec{J}$$

$g$  je gyromagnetický faktor, není kvantován, nabývá hodnot - 4 až + 6

$$\mu_j = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5,0505 \cdot 10^{-27} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$$

proton:  $g = 5,58$       neutron:  $g = -3,82$

**$g$  není kvantován  $\Rightarrow$  možnost analýzy**

NMR – nukleární magnetická rezonance (jaderná m. r.) - tomografy

## 4. Atomové jádro

### 4. 7. Magnetický moment jádra

Princip NMR: zkoumaná látka se umístí do magnetostatického pole, jádro změní energii o:

$$W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B \quad (\text{je-li magnetické pole orientováno ve směru osy } z)$$

dosazením za složku jaderného magnetického momentu:  $\mu_z = g\mu_j m_l \hbar$

$$W = -g\mu_j m_l \hbar \cdot B \quad \mu_l \text{ může nabývat } 2l + 1 \text{ hodnot}$$

rozdíl dvou sousedních energií:  $\Delta W = g\mu_j \hbar \cdot B$

měření  $\Delta W$  (a tím i  $g$ ): na vzorek se vyšle paprsek kolmý k magnetostatickému poli, jestliže

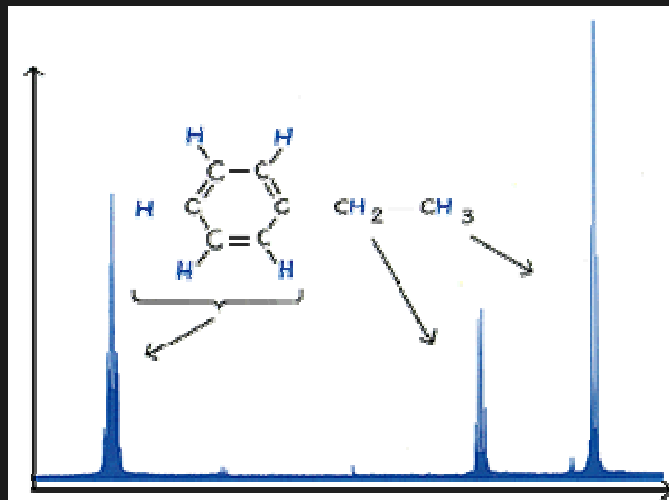
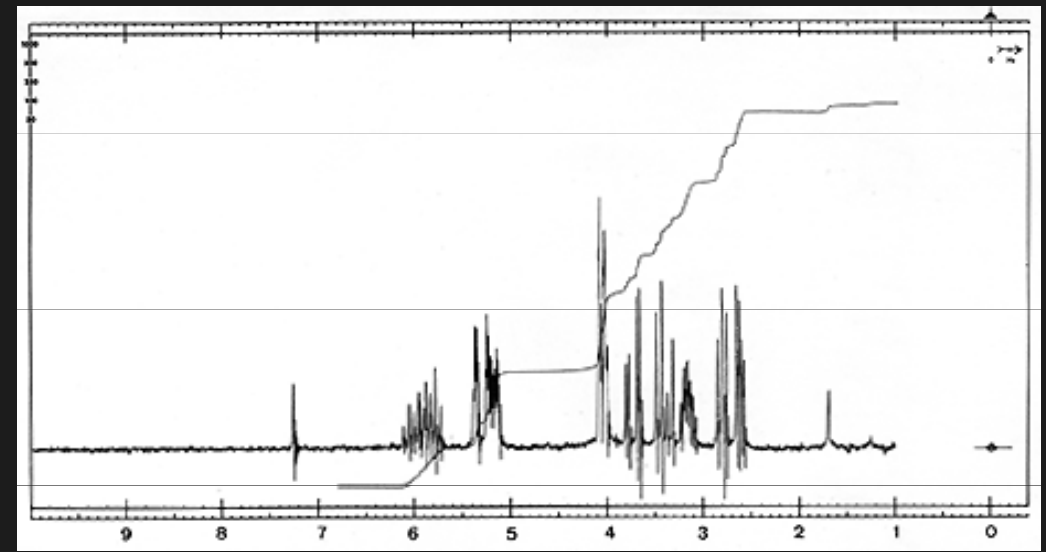
$h\nu < \Delta W$  nedochází k absorpci, jestliže  $h\nu = \Delta W$  je absorpce maximální, pak

lze měřením frekvence zjistit velikost  $g$  a tím identifikovat atom

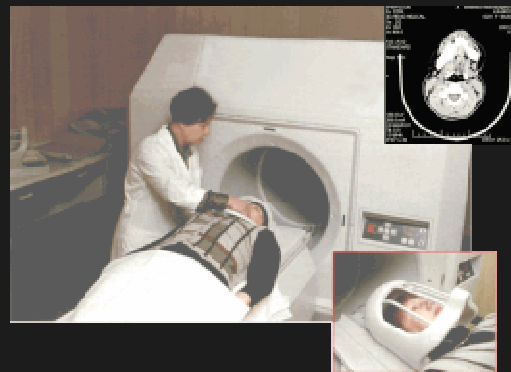
Při známém  $g$  lze měřit magnetickou indukci.

## 4. Atomové jádro

### 4. 7. Magnetický moment jádra



A proton NMR spectrum of a solution containing a simple organic compound, ethyl benzene. Each group of signals corresponds to protons in a different part of the molecule.



# 4. Atomové jádro

## 4. 8. Slupkový model jádra

1949 Mayerová, Jensen

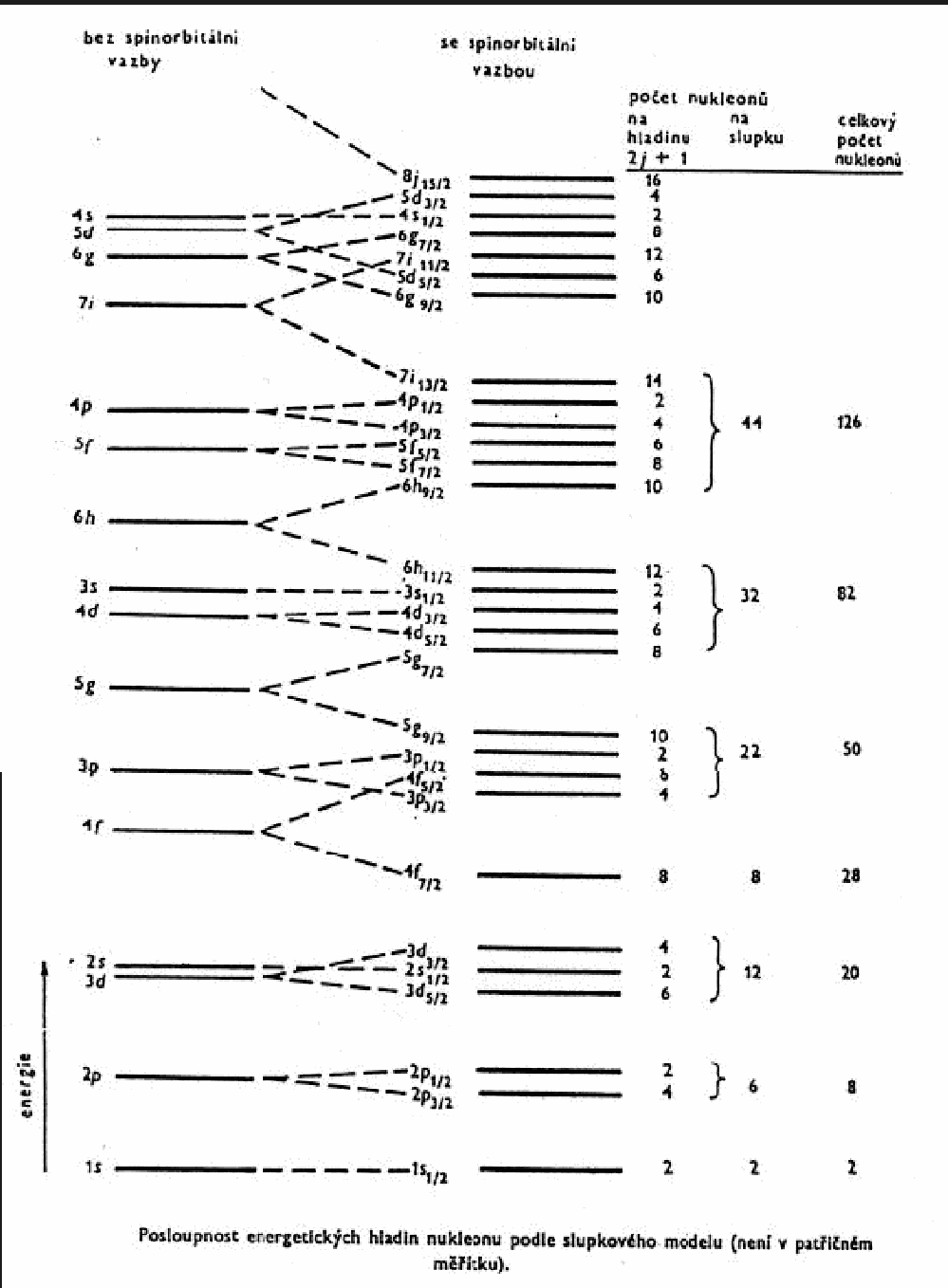
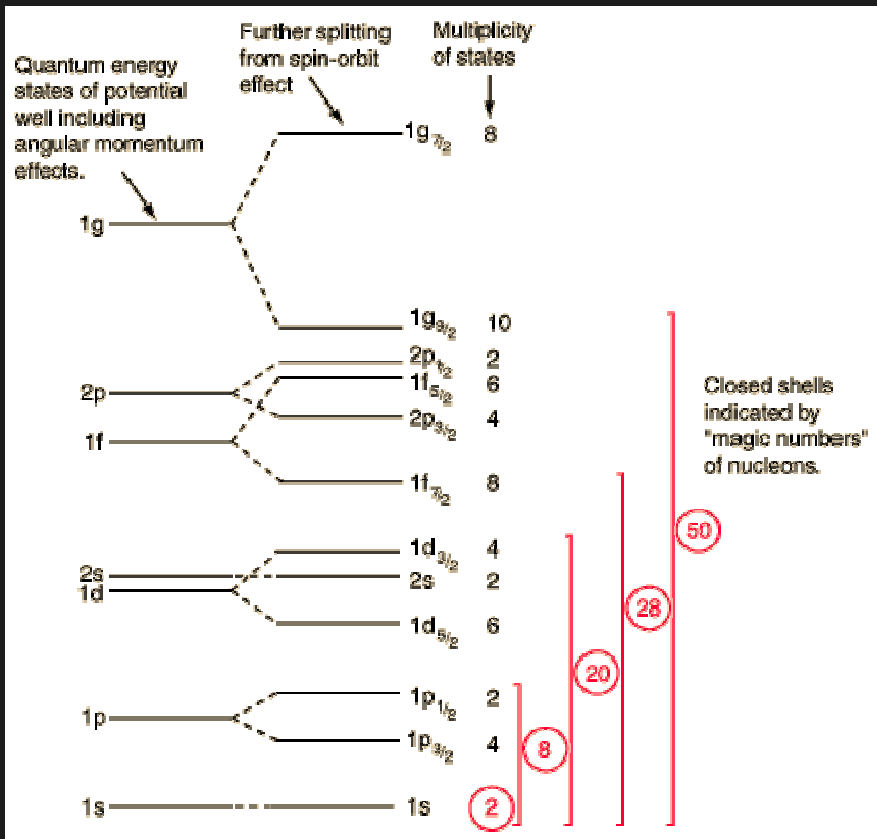


2, 8, 20, 28, 50, 82, 126

počty elektronů ve slupkách:



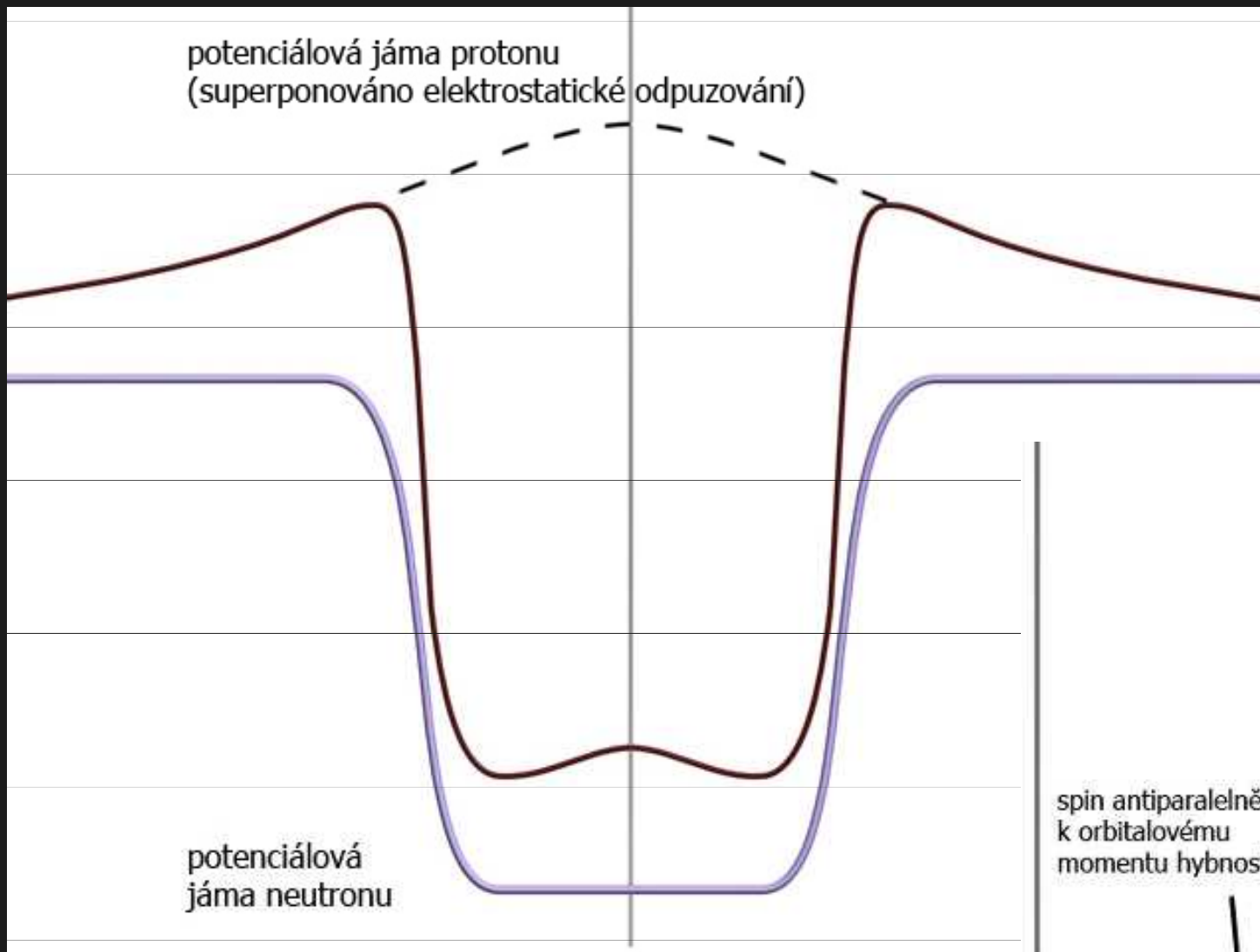
2, 6, 12, 8, 22, 32, 44





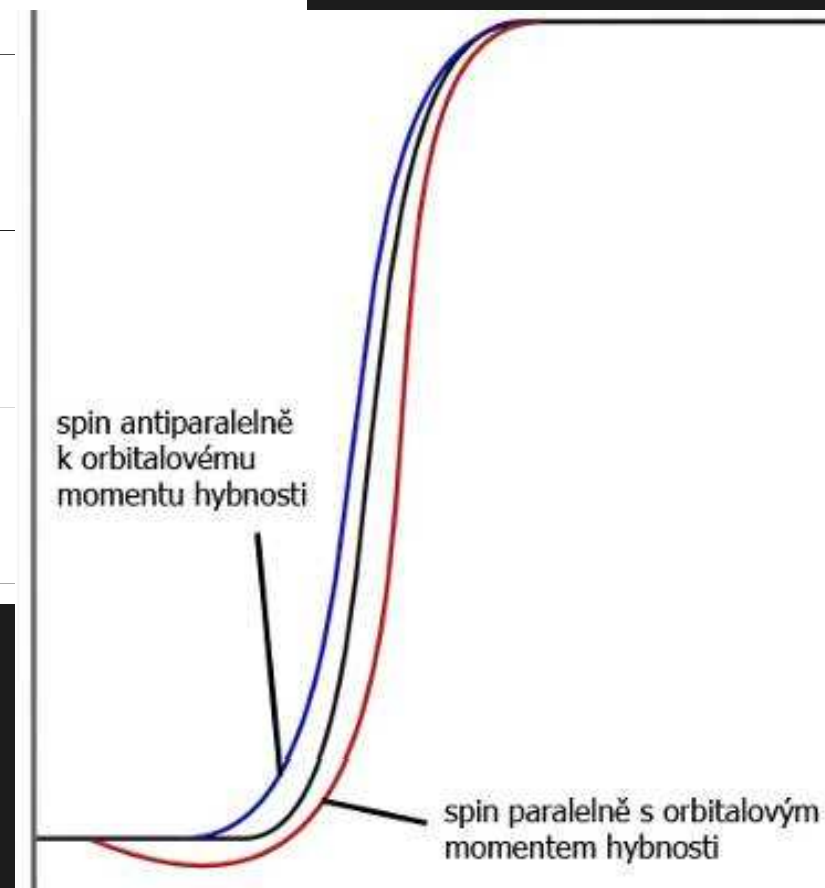
## 4. Atomové jádro

### 4. 8. Slupkový model jádra



slupkový model vysvětlil:

- velikost jaderných sil
- velikost magnetického momentu jader
- stabilita, nebo radioaktivita



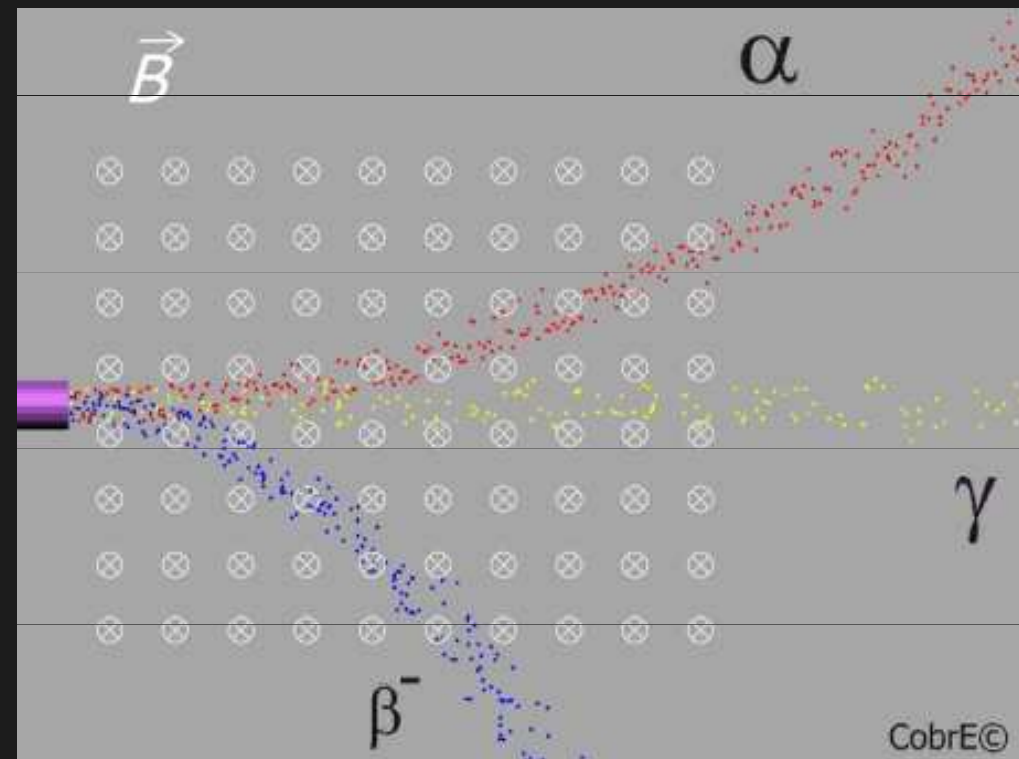
# 5. Radioaktivita

## 5. 1. Objev, základní vlastnosti záření

1896 Henri Antoine Becquerel (1852-1908)

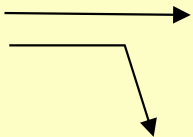
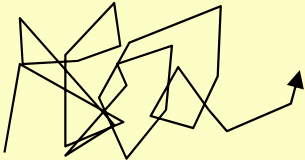
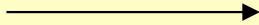


- z některých látek vychází neviditelné pronikavé záření
- záření má 3 složky
- nedá se ovlivnit žádnými fyzikálními ani chemickými procesy
- po roce 1911  $\Rightarrow$  musí pocházet z jádra atomu
- Rutherford: je pouze průvodním jevem přeměny jader



## 5. Radioaktivita

### 5. 1. Objev, základní vlastnosti záření

vlastnost	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	způsob zjištění
náboj	+2e	-e	0	v magnetickém poli
rychlost	$20 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$	$0,3 - 0,998 c$	$c$	hmot. spektroskopy
schopnost ionizace / i. p. / cm vzduchu	$10^5$	60 - 100	1	detektory
pronikavost	5 cm vzduch, 0,1 mm Al	3-5 mm Al	velká – nedá se odstínit	detektory
způsob šíření				zobrazovací detektory

## 5. Radioaktivita

### 5. 2. Rozpadový zákon

přeměny jader typu  $\alpha$ ,  $\beta$  – v procesu je skryta obrovská energie

jeden rozpad jádra uranu 5 MeV, v 1 gramu je  $2,5 \cdot 10^{21}$  atomů, při úplném rozpadu by se uvolnila energie  $12,5 \cdot 10^{27}$  eV =  $2 \cdot 10^9$  J = 550 kWh

hledaly se způsoby, jak rozpad urychlit, nedá se však ničím ovlivnit

aktivita: počet rozpadů za 1 s:  $A$ , jednotkou je  
1 becquerel = 1 bq = 1 rozpad za sekundu

aktivita závisí pouze na druhu radioaktivního se jádra a na počtu jader  $N$ :

$$A = -\frac{dN}{dt} = \lambda N$$

rozpadová konstanta, pro různé nuklidy  $10^{-30}$  až  $10^{20}$  s<sup>-1</sup>

z diferenciální rovnice  $\Rightarrow$  rozpadový zákon

$$N = N_0 \cdot e^{-\lambda t}$$

$$A = \lambda N_0 \cdot e^{-\lambda t}$$

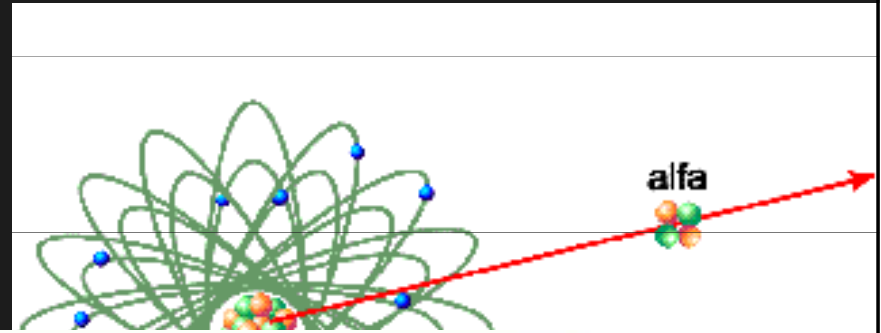
## 5. Radioaktivita

### 5. 2. Rozpadový zákon

Místo nepraktické rozpadové konstanty se spíše používá „poločas rozpadu“:  $T$  - doba, za kterou se rozpadne právě polovina původního počtu radioaktivních atomů.

$$\frac{N_0}{2} = N_0 \cdot e^{-\lambda T} \quad T = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

pro různé nuklidy je  $T$  od  $10^{-20}$  s do  $10^{20}$  roků

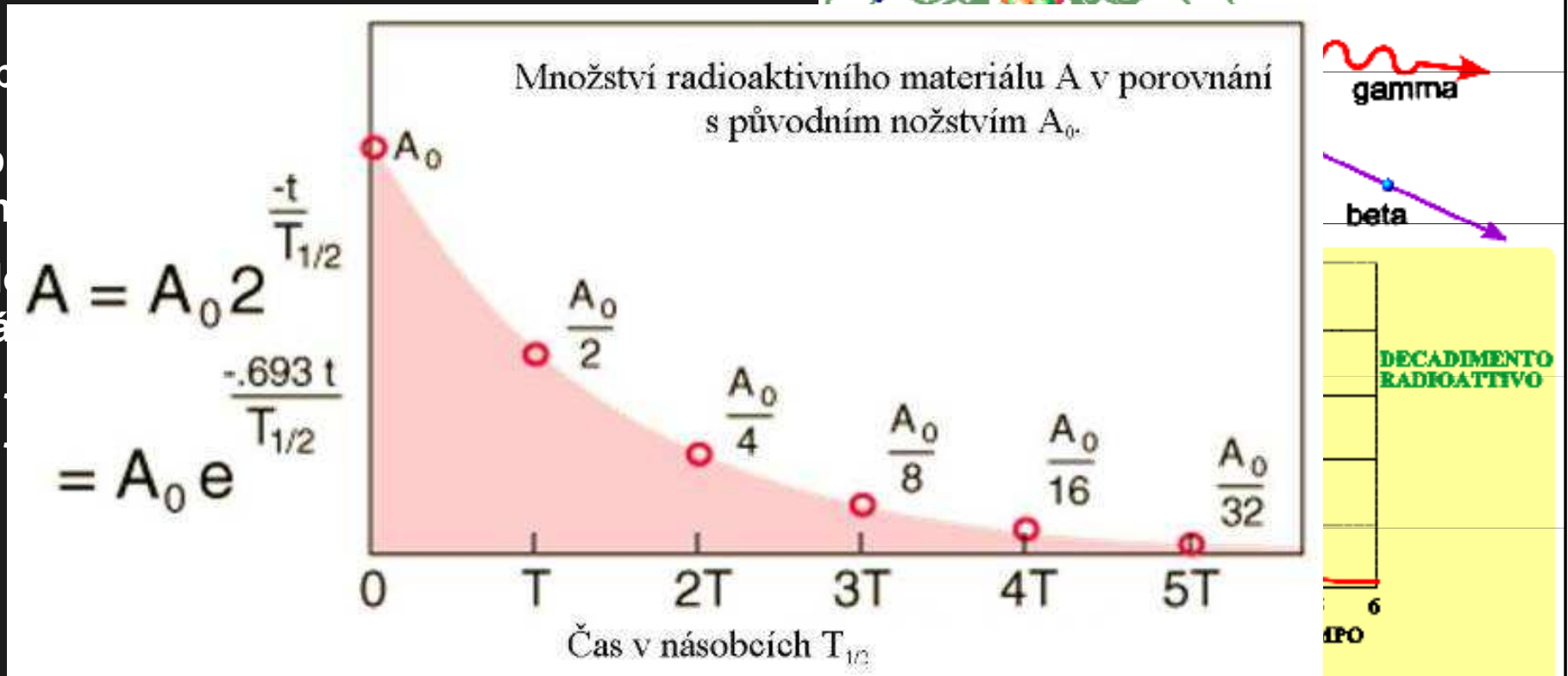


střední doba

problém: p  
radioaktivn

pravděpod  
že se jedná

- $\alpha$  rozpad
- $\beta$  rozpad

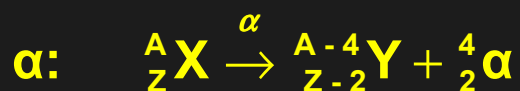


$T_f$  = PERIODO DI DIMEZZAMENTO FISICO

## 5. Radioaktivita

### 5. 3. Radioaktivní přeměny

Rutherford: radioaktivní záření je projevem přeměny (rozpadu) atomových jader.



přirozená radioaktivita: radioaktivita nuklidů vyskytujících se v přírodě

nejtěžší stabilní nuklid:  ${}^{209}_{83}\text{Bi}$  od  ${}_{84}\text{Po}$  jsou všechny prvky radioaktivní

A se při obou druzích radioaktivní přeměny mění buď o 4 nebo se nemění.

přirozeně radioaktivní nuklidy jsou proto součástí 4 radioaktivních řad:

- řada typu  $4n$ : thoriová



- řada typu  $4n+1$ : neptuniová



v přírodě již neexistuje

- řada typu  $4n+2$ : uranová



- řada typu  $4n+3$ : aktiniová



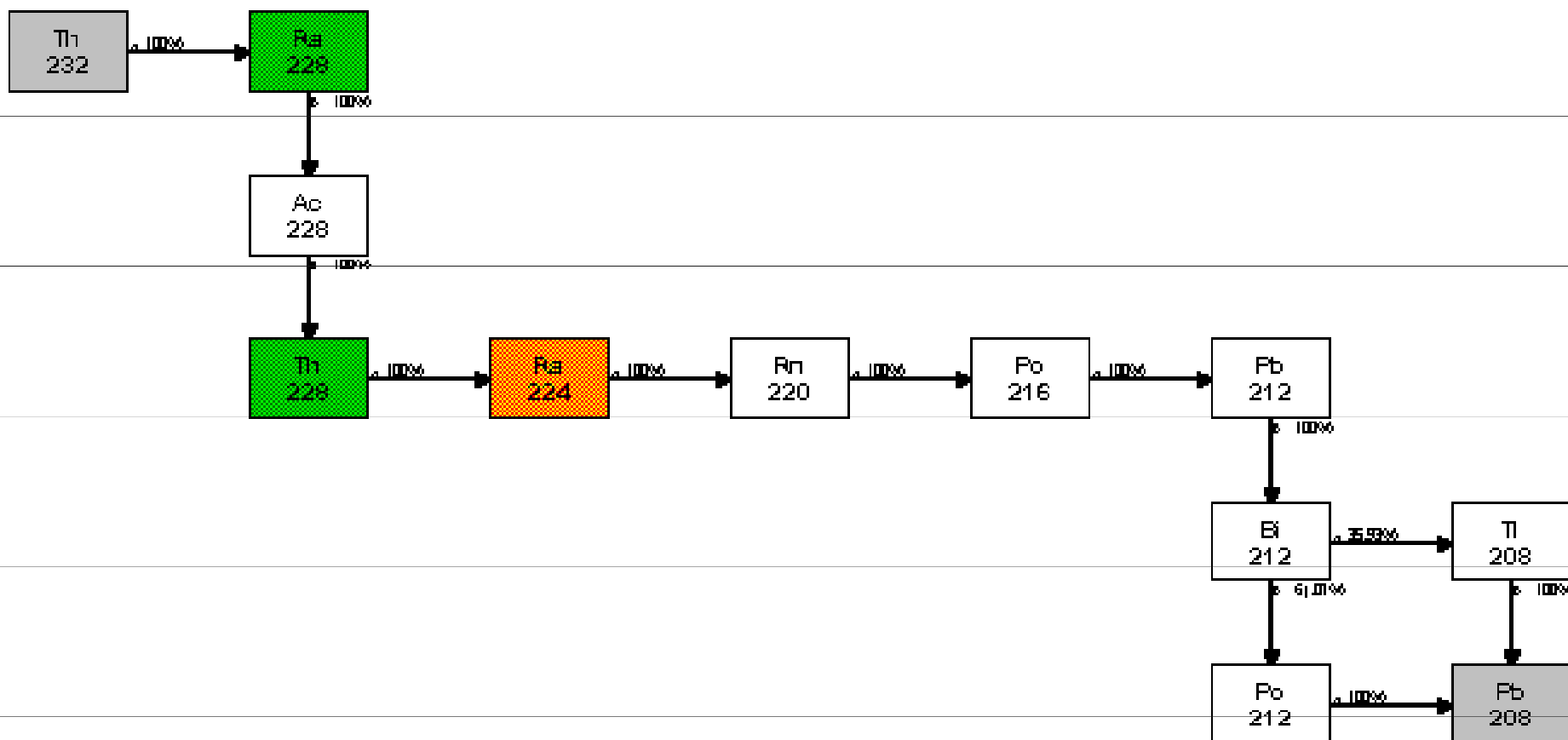
Ize jednoduše vypočítat, ke kolika přeměnám  $\alpha$  a ke kolika přeměnám  $\beta$  v řadě došlo



## 5. Radioaktivita

### 5.3. Radioaktivní přeměny

- řada typu 4n: thoriová

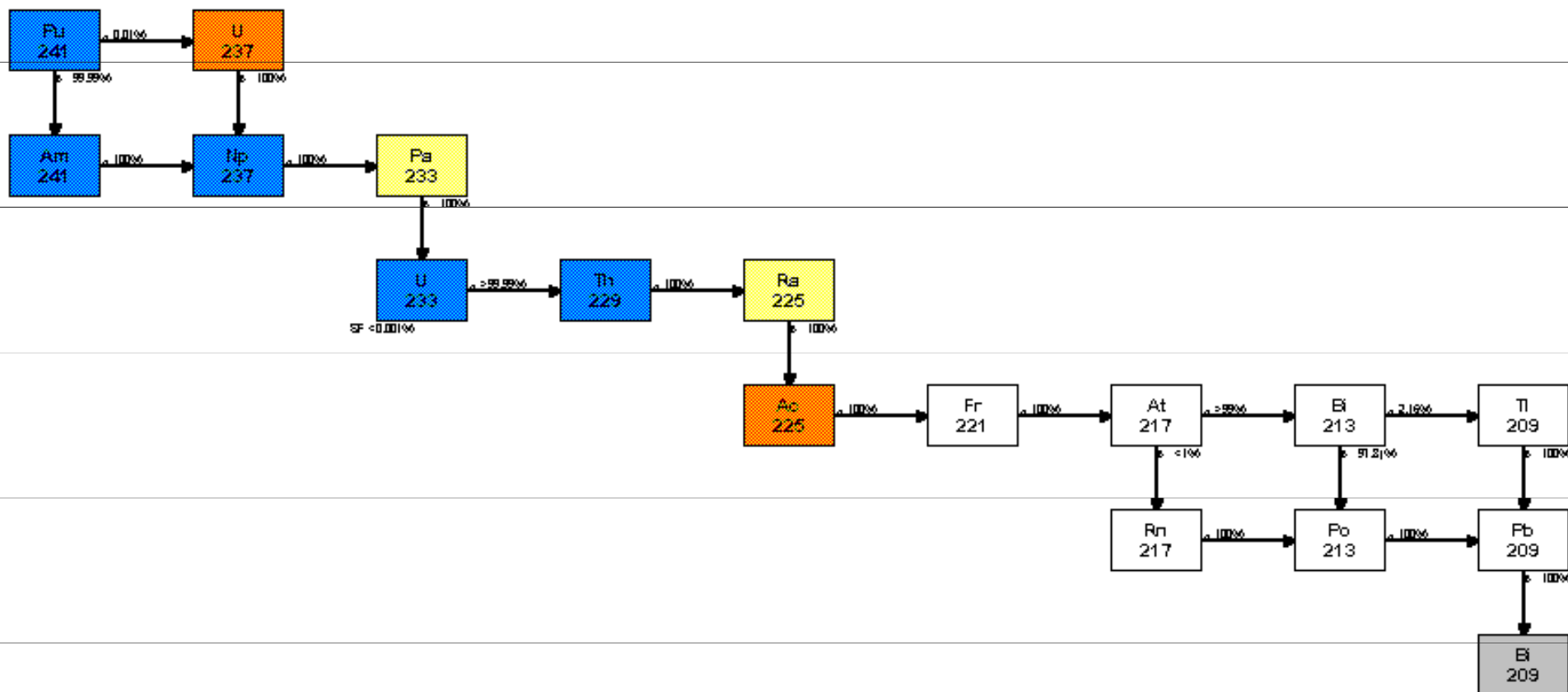




## 5. Radioaktivita

### 5. 3. Radioaktivní přeměny

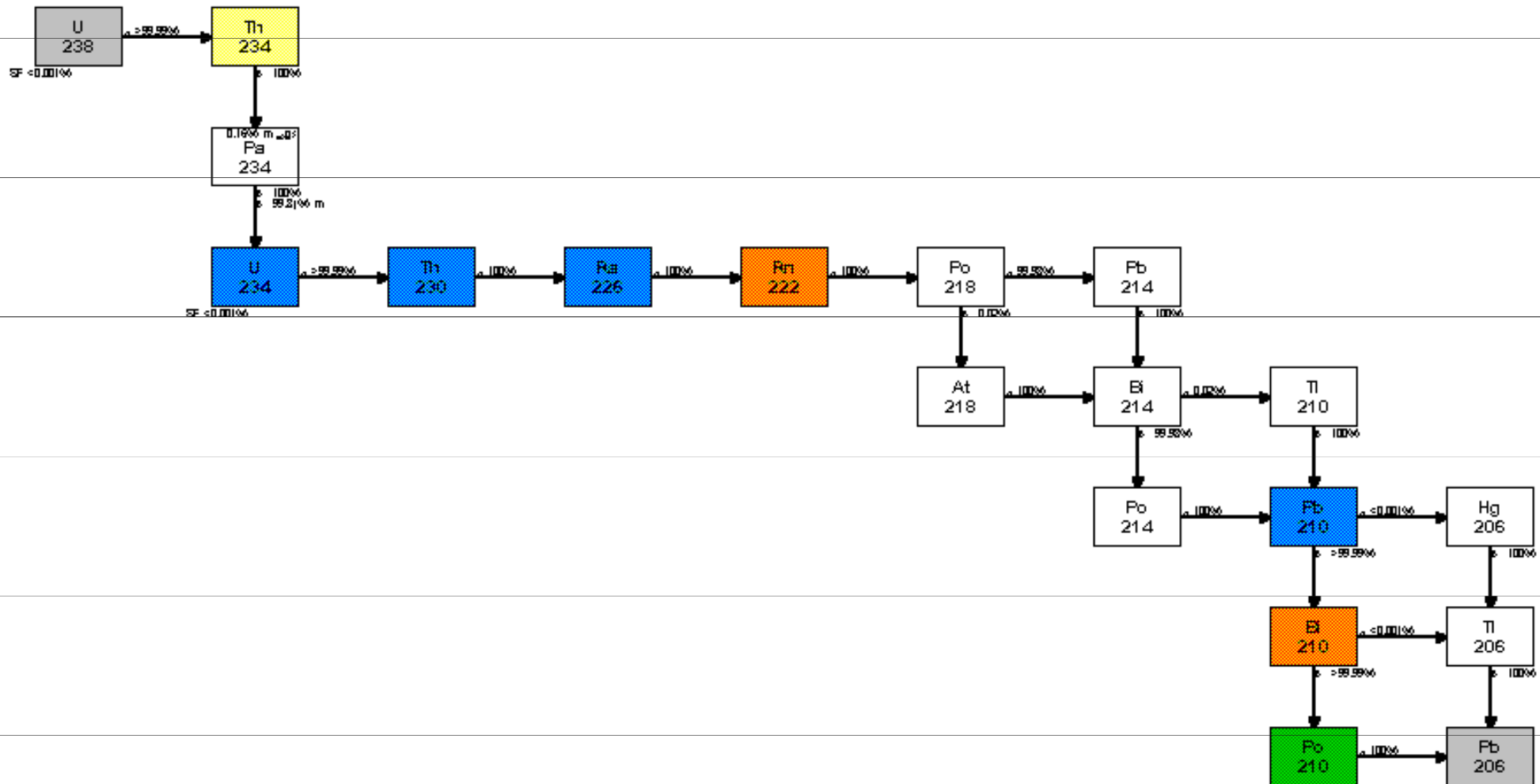
- řada typu  $4n+1$ : neptuniová



# 5. Radioaktivita

## 5.3. Radioaktivní přeměny

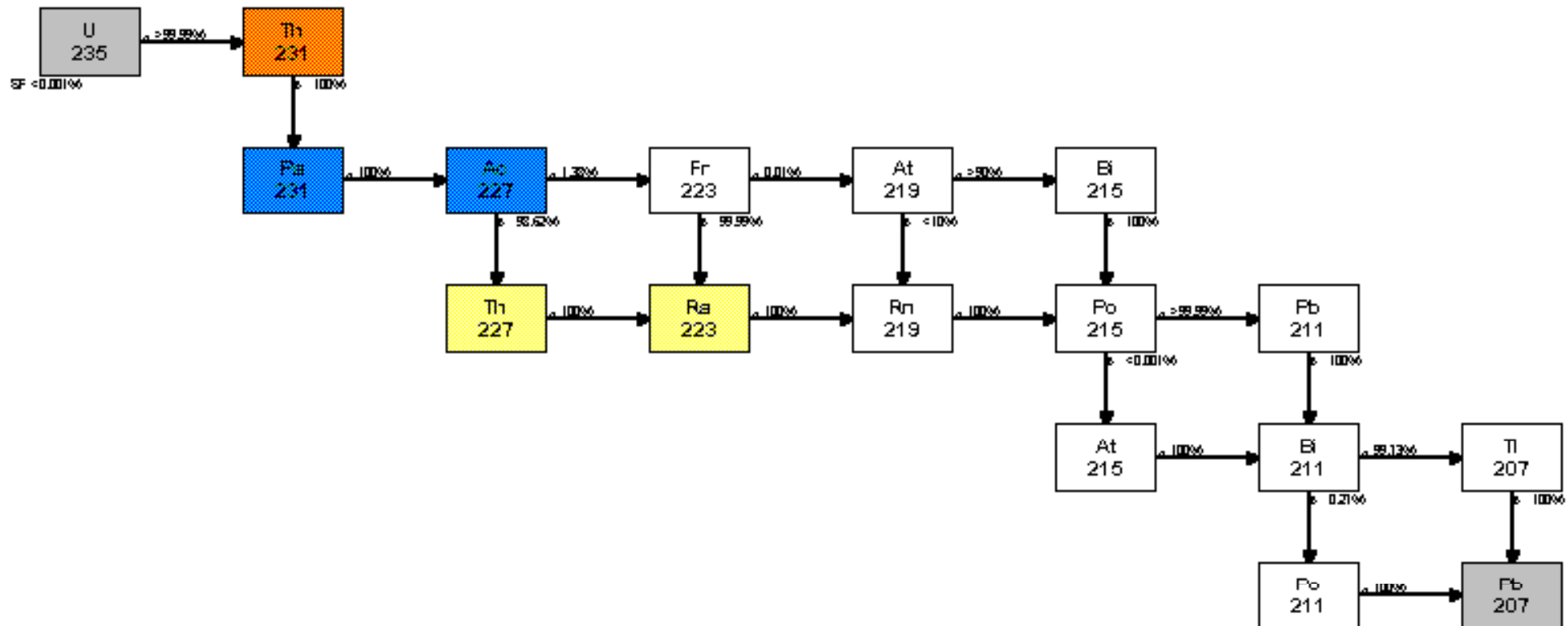
- řada typu  $4n+2$ : uranová



## 5. Radioaktivita

### 5.3. Radioaktivní přeměny

- řada typu  $4n+3$ : aktiniová



## 5. Radioaktivita

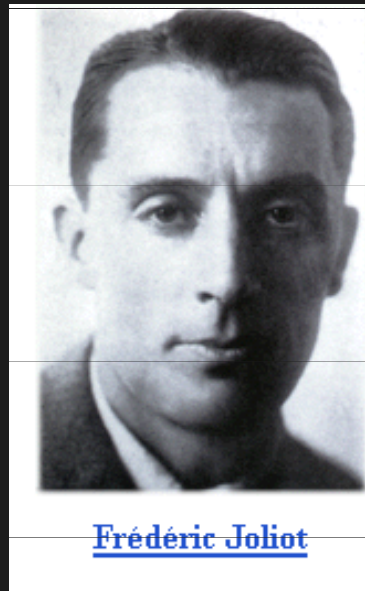
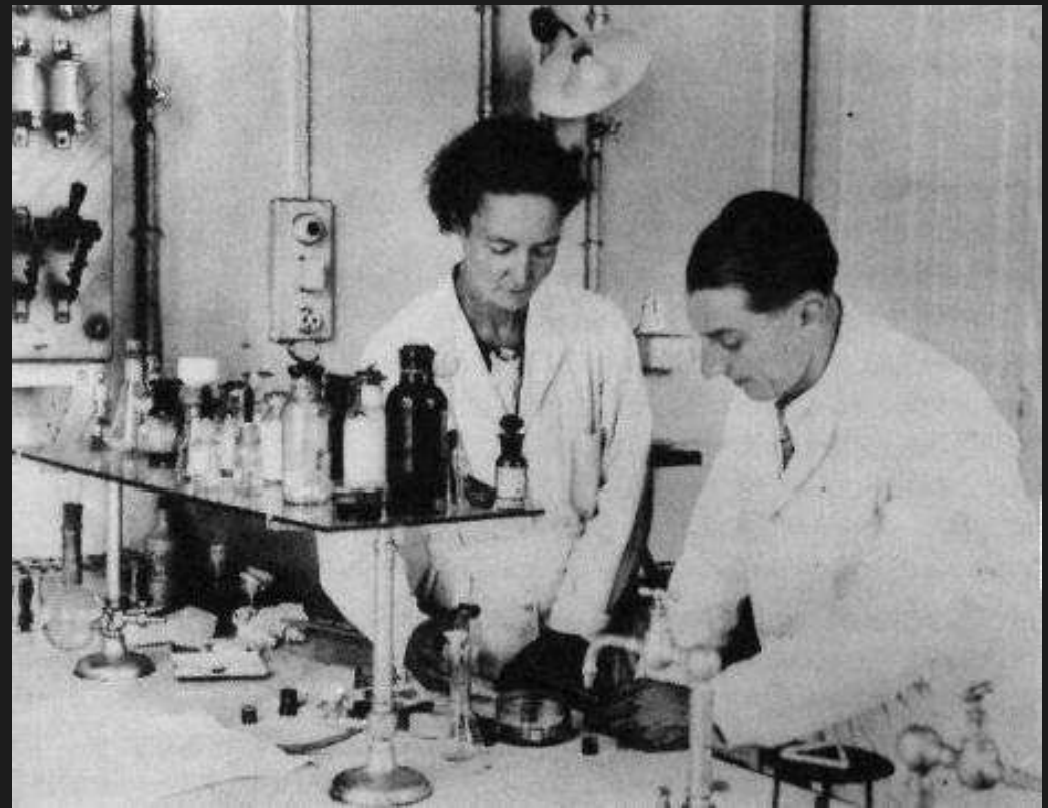
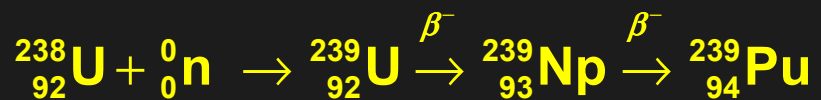
### 5. 4. Umělá radioaktivita

1934 manželé Joliot-Curieovi



jaderná reakce, pozitronový rozpad

dnes - nejefektivnější způsob:  
ozařování neutrony



Frédéric Joliot



Irène Joliot-Curie

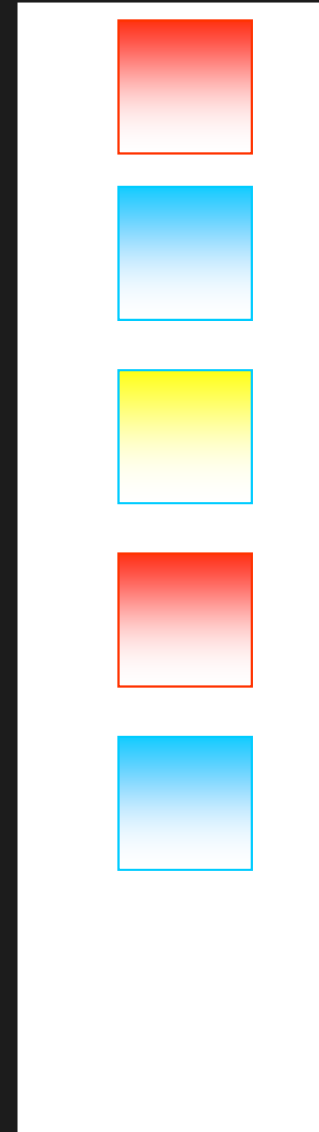
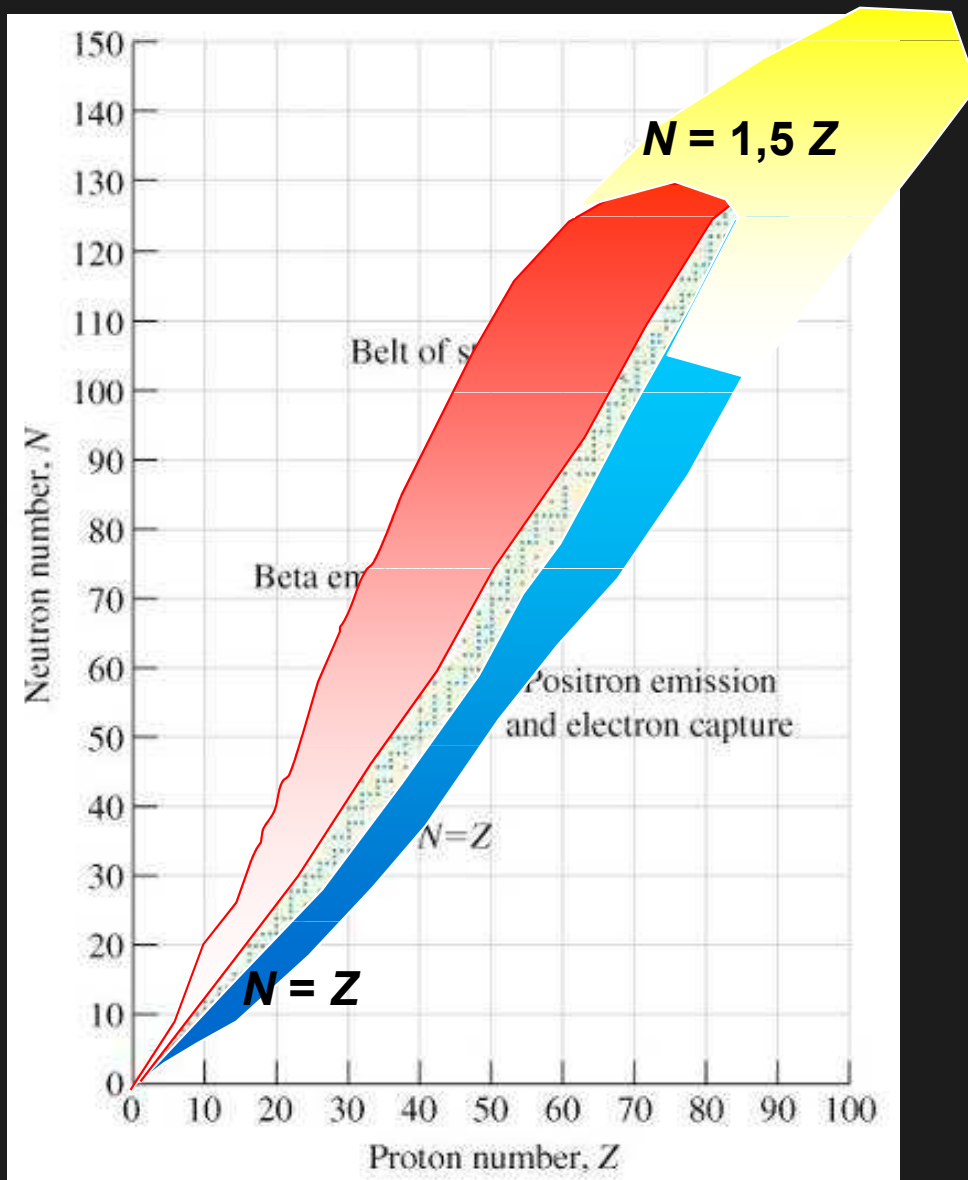
Frédéric Joliot (1900-1958),

Irène Joliot-Curie (1897–1956)

## 5. Radioaktivita

### 5. 5. Diagram stabilních nuklidů

jádro je radioaktivní, je-li separační energie pro emitovanou částici  $< 0$



rozpad  $\beta^-$

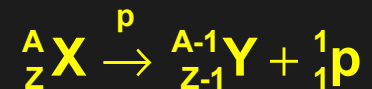
rozpad  $\beta^+$

rozpad  $\alpha$

emise neutronu



emise protonu



## 5. Radioaktivita

# 5. 6. Postupný rozpad, radioaktivní rovnováha

Jaká je bilance při postupném rozpadu?

**1** → **2** → **3** → ..... → **i** → ..... **s**

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 \cdot N_1$$

$$N_1 = N_{10} \cdot e^{-\lambda_1 t} = c_{11} \cdot e^{-\lambda_1 t}$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \lambda_1 \cdot N_1 - \lambda_2 \cdot N_2$$

řešení druhé diferenciální rovnice: homogenní rovnice:

$$\frac{dN_2}{dt} = -\lambda_2 \cdot N_2 \Rightarrow N_{2h} = c_{22} \cdot e^{-\lambda_2 t}$$

partikulární řešení navrhne ve tvaru:

$$N_{2p} = c_{21} \cdot e^{-\lambda_1 t} \quad \text{dosazením:}$$

$$-\lambda_1 \cdot c_{21} \cdot e^{-\lambda_1 t} = \lambda_1 \cdot c_{11} \cdot e^{-\lambda_1 t} - \lambda_2 \cdot c_{21} \cdot e^{-\lambda_1 t} \quad \text{odtud:}$$

$$c_{21} = \frac{\lambda_1 \cdot c_{11}}{\lambda_2 - \lambda_1}$$

z počáteční podmínky:  $N_2(0) = 0$

$$0 = c_{21} + c_{22} \Rightarrow c_{22} = -c_{21}$$

$$\frac{dN_i}{dt} = \lambda_{i-1} \cdot N_{i-1} - \lambda_i \cdot N_i$$

$$\frac{dN_s}{dt} = \lambda_{s-1} \cdot N_{s-1}$$

$$N_2(t) = \frac{\lambda_1 \cdot N_{10}}{\lambda_2 - \lambda_1} \cdot (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t})$$

## 5. Radioaktivita

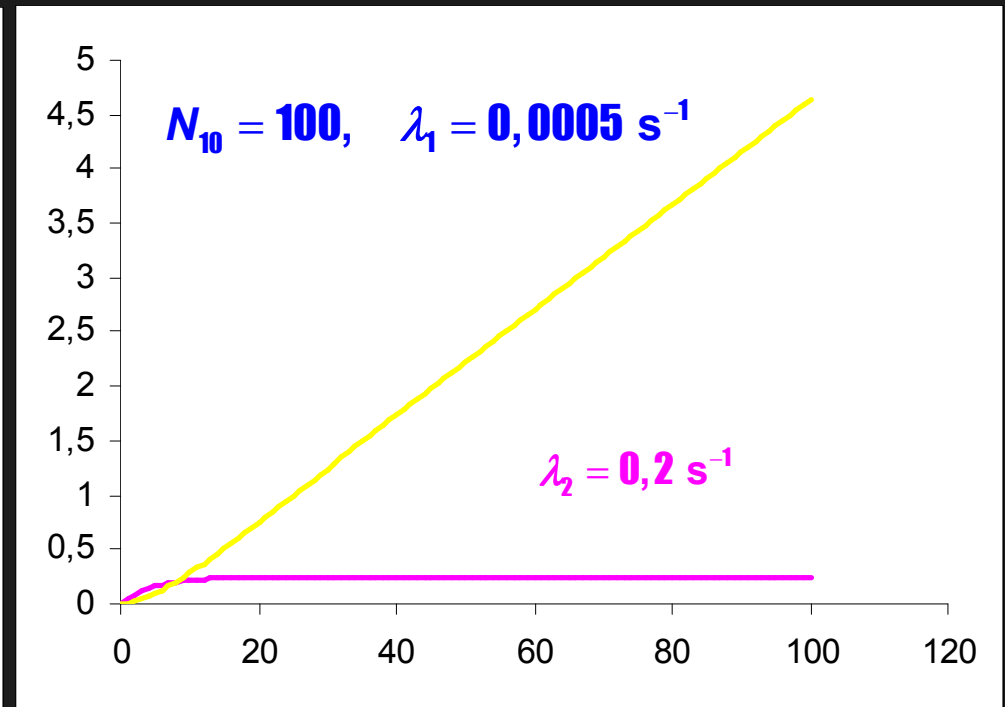
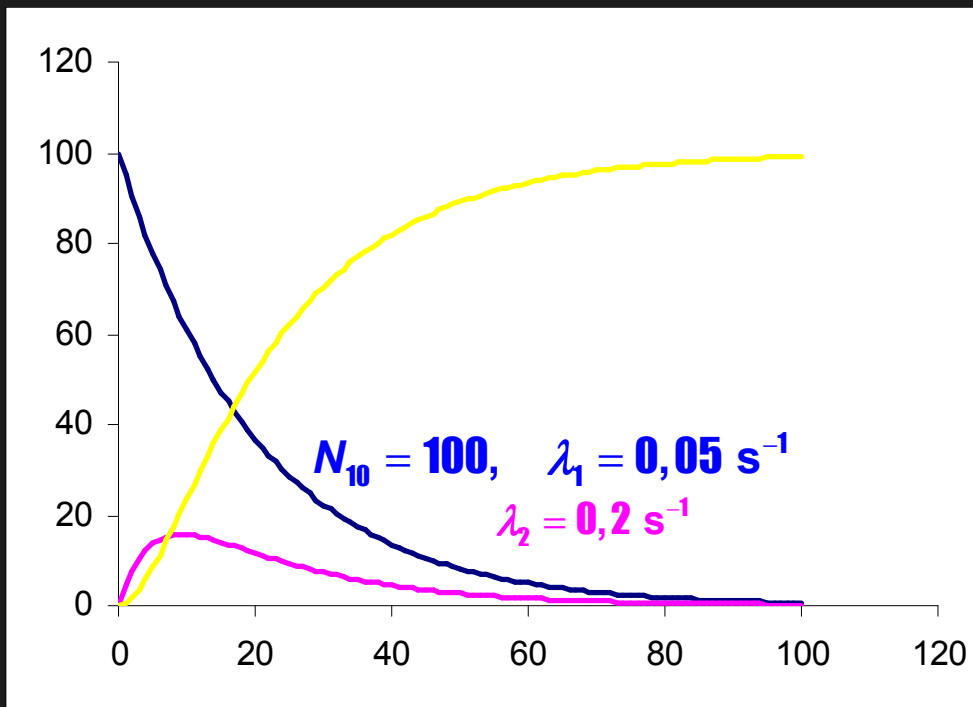
### 5. 6. Postupný rozpad, radioaktivní rovnováha

řešení  $i$  - té rovnice:

$$N_i(t) = \sum_{j=1}^i c_{ij} e^{-\lambda_j t} \quad c_{ij} = c_{i-1,j} \frac{\lambda_{i-1}}{\lambda_i - \lambda_j} \quad c_{ii} = -\sum_{k=1}^{i-1} c_{ik}$$

řešení  $s$  - té rovnice (jako  $i$  - tá pro  $\lambda_s = 0$ )

$$N_s(t) = c_{ss} + \sum_{j=1}^{s-1} c_{sj} e^{-\lambda_j t} \quad c_{sj} = -c_{s-1,j} \frac{\lambda_{s-1}}{\lambda_j} \quad c_{ss} = c_{10} = N_{10}$$



## 5. Radioaktivita

### 5. 6. Postupný rozpad, radioaktivní rovnováha

$$\text{je-li } \lambda_1 \ll \lambda_2 \quad N_2(t) = \frac{\lambda_1 \cdot N_{10}}{\lambda_2 - \lambda_1} \cdot (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}) \cong \frac{\lambda_1 \cdot N_{10}}{\lambda_2} \cdot (1 - 0)$$

$N_2$  je proto v malých časech konstantní a platí:

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{T_1}{T_2}$$

**zákon radioaktivní rovnováhy**

podmínka  $\lambda_1 \ll \lambda_2$  je splněna ve všech rozpadových řadách, v historických dobách existuje u přírodních radioaktivních nuklidů rovnováha



## 5. Radioaktivita

### 5. 6. Postupný rozpad, radioaktivní rovnováha

**Příklad: Před 3 miliardami let byl vytvořen 1 kg čistého U238. Jaké je zastoupení jednotlivých nuklidů rozpadové řady v současnosti?**

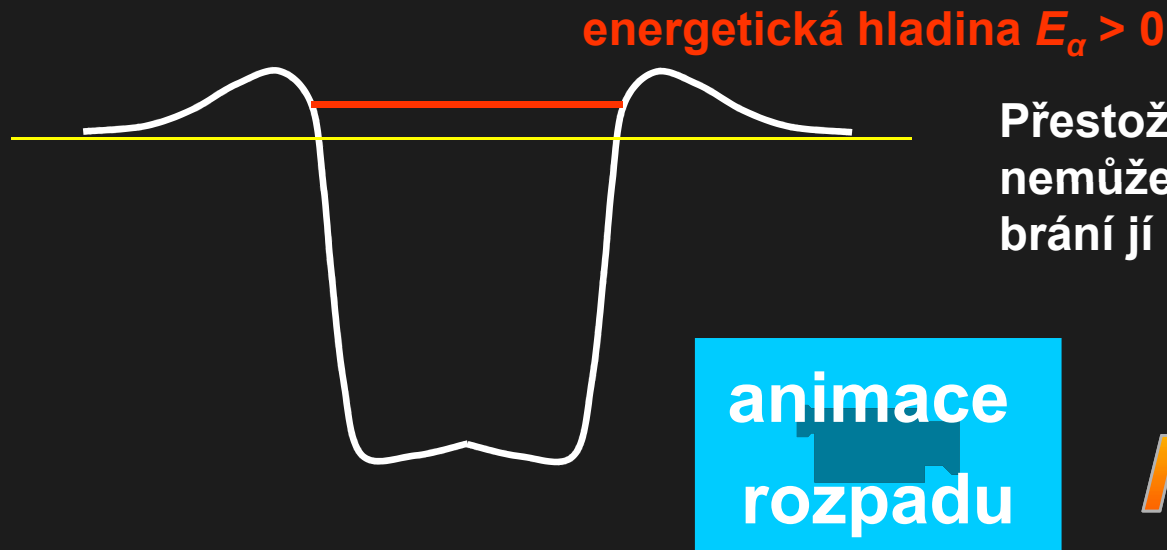
nuklid	poločas rozpadu / rok	poměrné zastoupení	počet atomů v současnosti	aktivita / Bq	Z	A	hmotnost / kg
U 238	4500000000	0,63	1,59E+24	7,78E+06	92	238	6,30E-01
Th 234	0,0657	9,198E-12	2,33E+13	7,78E+06	90	234	9,04E-12
Pa 234	0,000764	1,07E-13	2,71E+11	7,78E+06	91	234	1,05E-13
U 234	250000	0,000035	8,86E+19	7,78E+06	92	234	3,44E-05
Th 230	75000	0,0000105	2,66E+19	7,78E+06	90	230	1,01E-05
Ra 226	1600	2,24E-07	5,67E+17	7,78E+06	88	226	2,13E-07
Rn 222	0,0105	1,47E-12	3,72E+12	7,78E+06	86	222	1,37E-12
Po 218	0,00000589	8,246E-16	2,09E+09	7,78E+06	84	218	7,55E-16
Pb 214	0,0000513	7,182E-15	1,82E+10	7,78E+06	82	214	6,45E-15
Bi 214	0,000038	5,32E-15	1,35E+10	7,78E+06	83	214	4,78E-15
Po 214	5,07E-12	7,098E-22	1,80E+03	7,78E+06	84	214	6,38E-22
Pb 210	22	3,08E-09	7,79E+15	7,78E+06	82	210	2,72E-09
Bi 210	0,0137	1,918E-12	4,85E+12	7,78E+06	83	210	1,69E-12
Po 210	0,383	5,362E-11	1,36E+14	7,78E+06	84	210	4,73E-11
Pb 206	∞	0,36995	9,36E+23	0	82	206	3,20E-01
celkem			2,53E+24	1,09E+08			0,95
He 4			7,49+E24	0	2	4	4,98E-02

## 5. Radioaktivita

### 5. 7. Rozpad $\alpha$

Nutná a postačující podmínka pro rozpad alfa: nejnižší energetická hladina částice  $\alpha$  v jádře je  $>0$ :

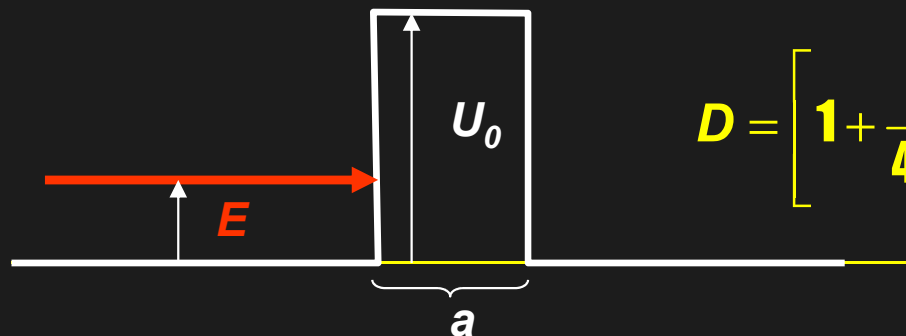
průběh potenciálu částice  $\alpha$  v okolí jádra



Přestože částice  $\alpha$  má energii kladnou, nemůže opustit jádro klasickým způsobem, brání jí v tom Coulombovská bariéra.

# TUNELOVÝ JEV

při pravoúhlé bariéře:



$$D = \left[ 1 + \frac{U_0^2}{4E \cdot (U_0 - E)} \cdot \sinh^2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot (U_0 - E) \cdot a} \right]^{-1}$$

## 5. Radioaktivita

### 5. 7. Rozpad $\alpha$

Při bariéře obecného tvaru se používá numerického postupu: bariéra se aproximuje velkým počtem pravoúhlých bariér a výsledná pravděpodobnost se určí součinem:

$$D_i = \left[ 1 + \frac{U_{0i}^2}{4E \cdot (U_{0i} - E)} \cdot \sinh^2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot (U_{0i} - E) \cdot a_i} \right]^{-1} \quad D = \prod D_i$$

Celková pravděpodobnost úniku částice  $\alpha$  přes Coulombovskou bariéru je pak:

$$\lambda = \lambda_\alpha \cdot \lambda_p \cdot D$$



pravděpodobnost toho, že částice  $\alpha$  je na povrchu jádra

pravděpodobnost vzniku částice  $\alpha$  v jádře

Přibližný tvar pro výpočet  $\lambda$  byl znám již před kvantovou mechanikou:

$\lambda$  je velmi malé ( $10^{-20}$  až  $10^{-50}$ ), proto  $\sinh^2 x \cong \frac{e^{2x}}{4}$ ,  $\frac{U_{0i}^2}{16E \cdot (U_{0i} - E)} \approx 1$

$$D = e^{-G}, \quad G = \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \cdot \int_R^{R_E} \left( \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right)^{\frac{1}{2}} dr \quad G - \text{Gamowův faktor}$$

## 5. Radioaktivita

### 5.7. Rozpad $\alpha$

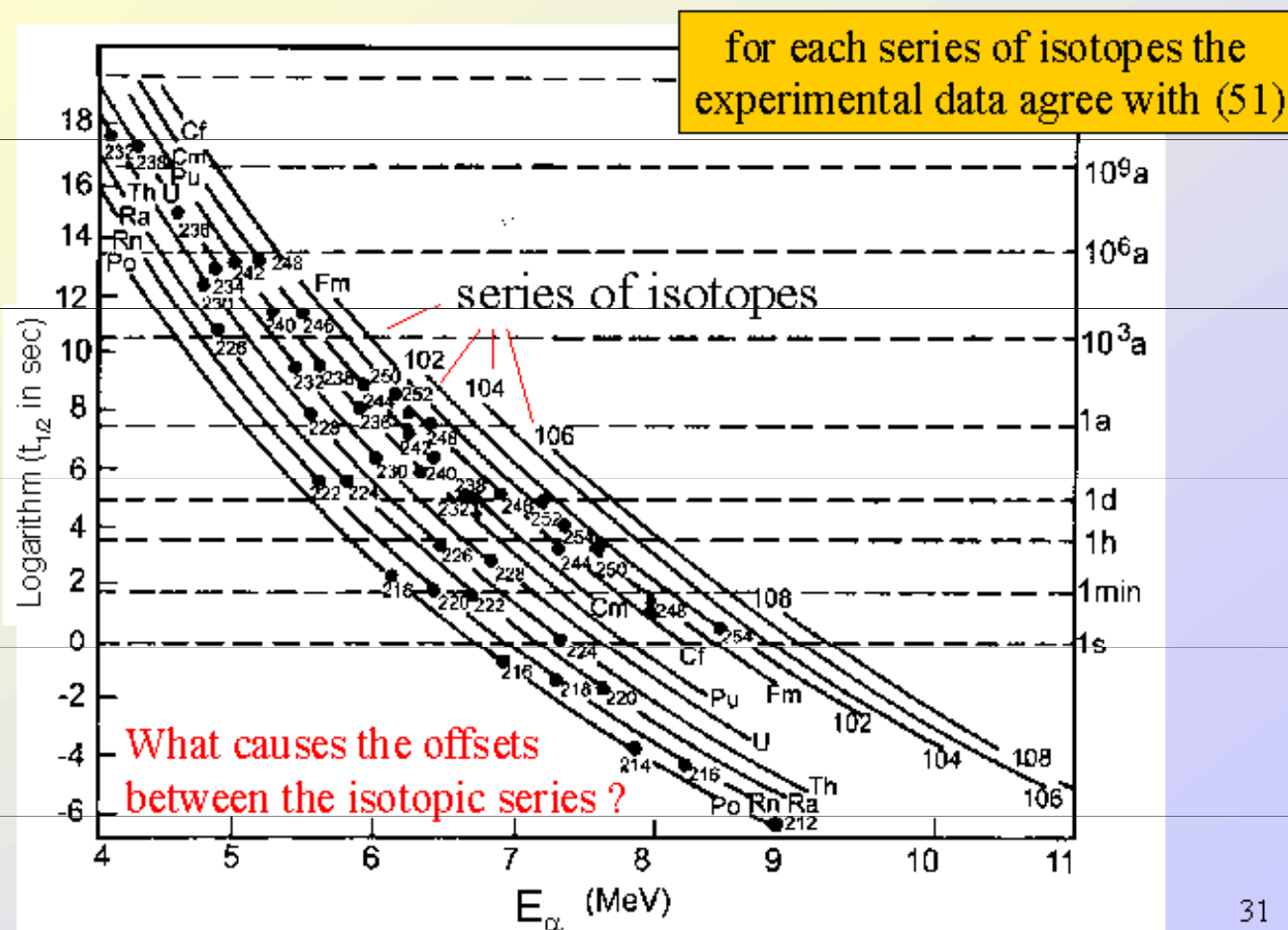
$$\ln \lambda = -a_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} + a_2$$

$a_1, a_2$  konstanty jednotlivých rozpadových řad

čím větší energii má částice  $\alpha$ , tím menší je poločas rozpadu

### Geiger-Nuttall Rule

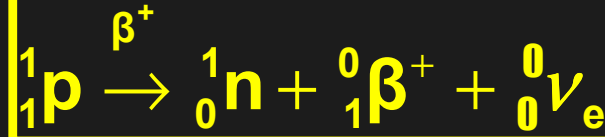
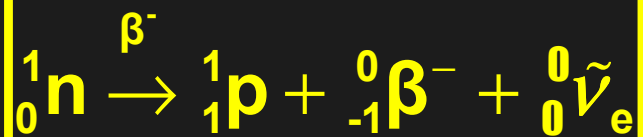
The logarithm of the half-life decreases with increasing emission energy  $E_\alpha$



## 5. Radioaktivita

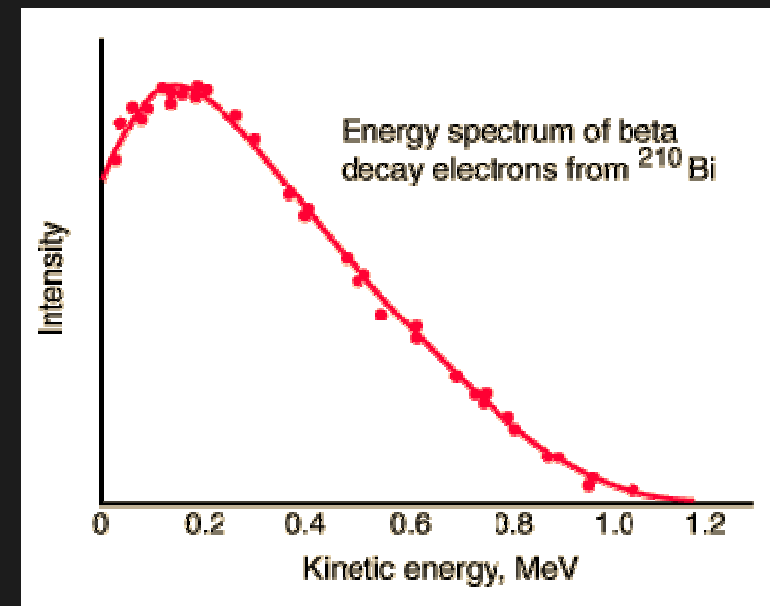
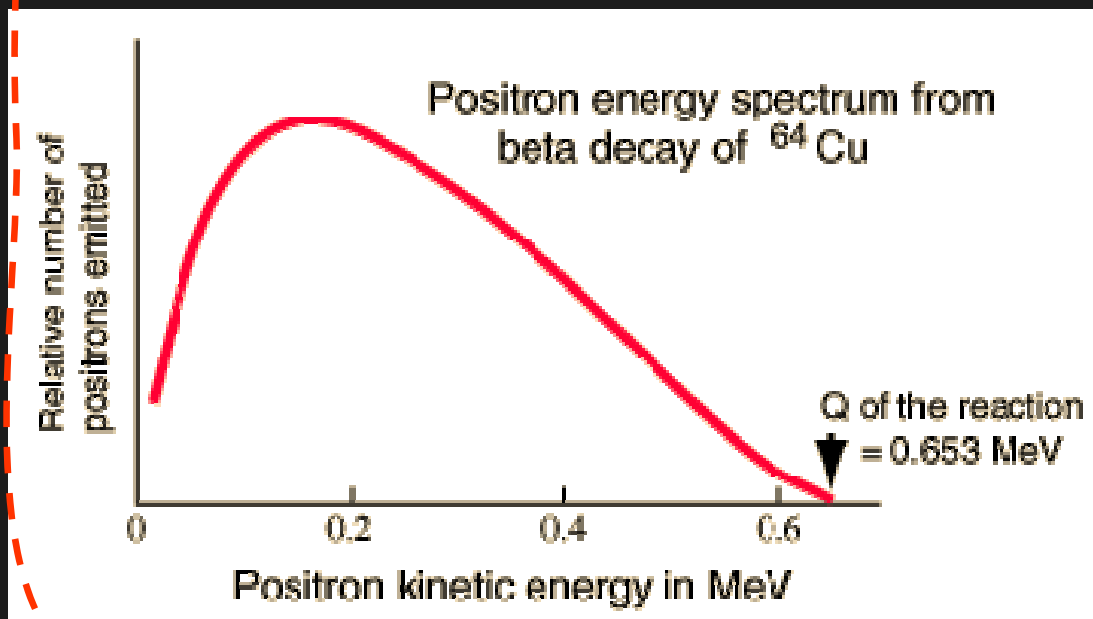
### 5. 8. Přeměna $\beta$

podstatou přeměny nukleonů



bez neutrina by byl porušen zákon zachování energie, hybnosti, momentu hybnosti

neutrino: W. Pauli 1934



→ probíhá i u volného neutronu s poločasem rozpadu 11,7 minut

## 5. Radioaktivita

### 5. 9. Ostatní druhy radioaktivních přeměn

#### a) vznik záření $\gamma$

po primární přeměně  $\alpha$ ,  $\beta$  může vzniknout jádro v excitovaném stavu, ze kterého přechází do základního vyzářením fotonu:



Excitované jádro má kvantované hodnoty energie  $\Rightarrow$  spektrum  $\gamma$  je čárové, má několik charakteristických energií, lze tedy poznat, o jaké jádro jde. Na tom je založena spektrální gama analýza.

Zvláštní případ: gama foton vykoná při průletu obalem fotoelektrický jev: předá veškerou svoji energii obalovému elektronu; z atomu pak vylétá elektron se zcela přesnou energií (na rozdíl od beta přeměny) – **elektronová konverze**

#### b) K záchyt

Jádra s přebytkem protonů mohou pohltnout elektron ze slupky K a změnit tak proton na neutron (obdoba pozitronové přeměny):



#### c) emise neutronu, emise protonu

## 5. Radioaktivita

### 5. 9. Ostatní druhy radioaktivních přeměn

#### d) spontánní štěpení

Velmi těžká jádra se mohou spontánně rozdělit na 2 lehčí. Velmi vzácně může tento děj probíhat i u uranu 238 a 235 (tisíciny procenta), běžnější je u Cf252 s poločasem rozpadu 2,64 roku. Protože se při štěpení uvolňuje několik neutronů, používá se tento nuklid jako zdroj neutronů.

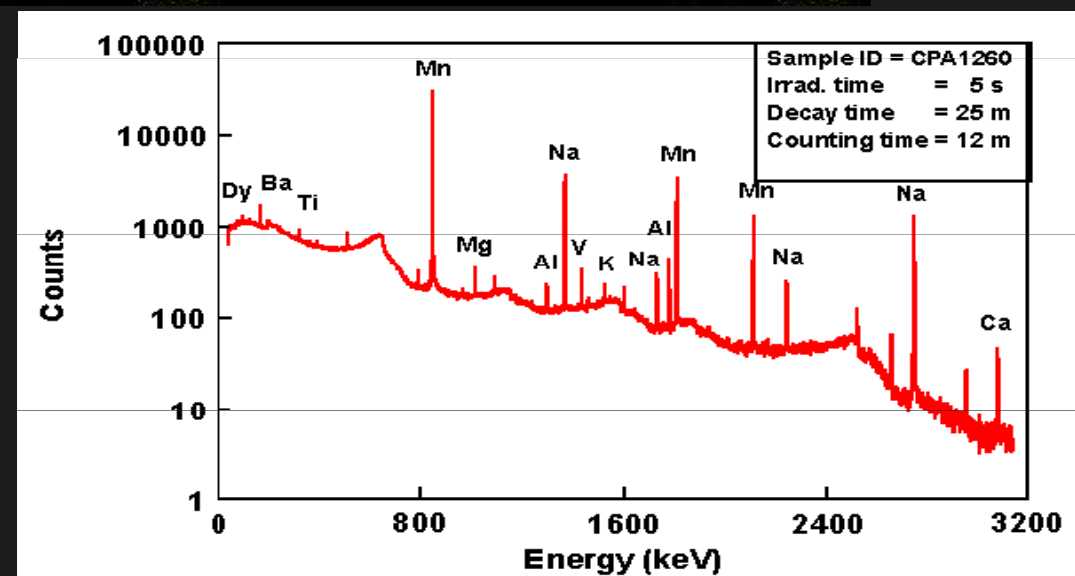
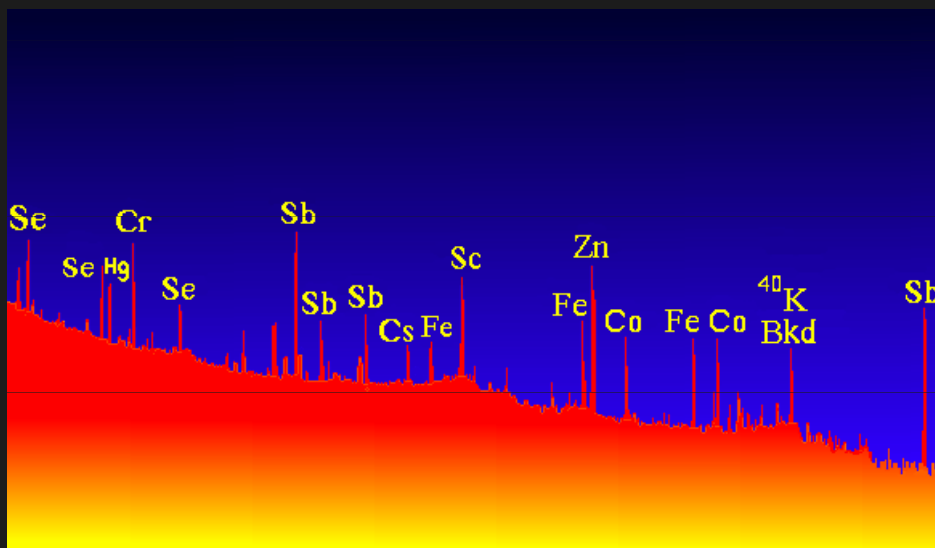
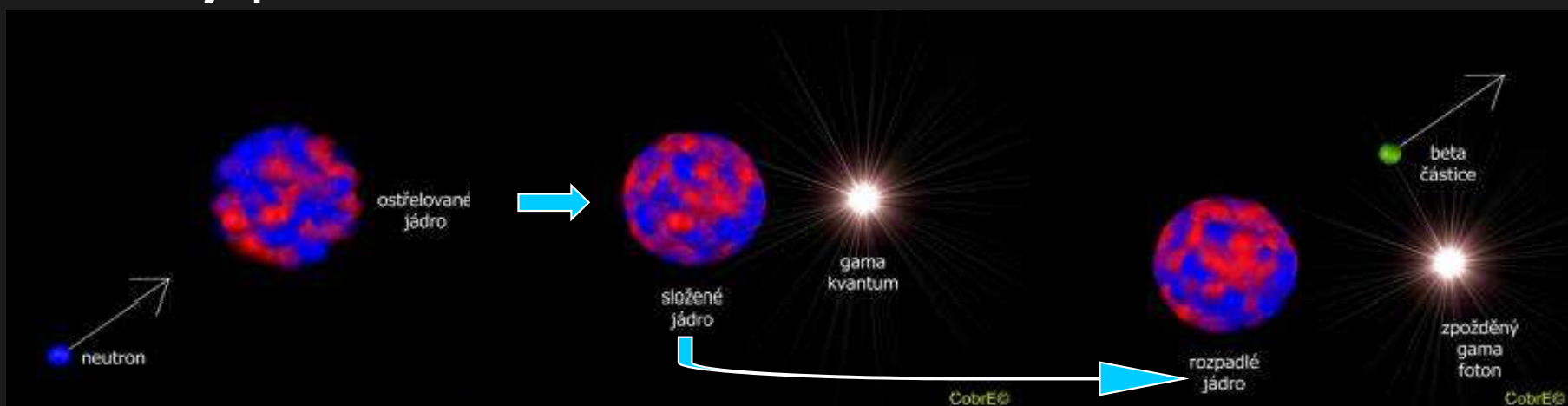


## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### a) neutronová aktivační analýza - Neutron activation analysis (NAA)

Neutrony velmi snadno pronikají do jader: neexistuje pro ně Coulombovská bariéra. Jádru se dostane do excitované stavy: vyzáří charakteristický foton gama. V jádru je pak přebytek neutronů a jádro se tak zpravidla stane radioaktivním, nejčastěji  $\beta^-$ . Zbytek energie se pak může vyzářit ještě dalším fotonem gama. Analýzou všech produktů se identifikuje původní atom.



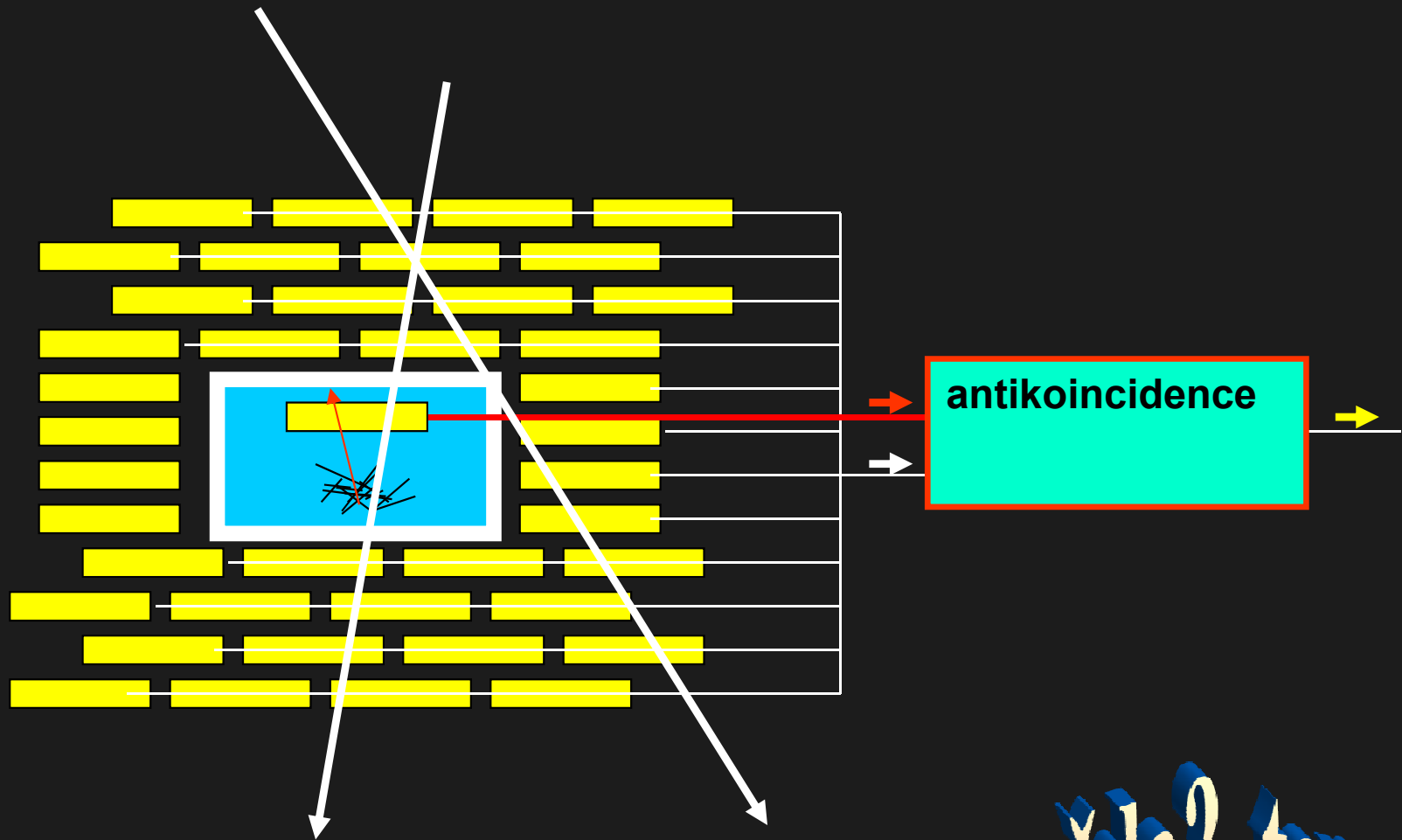


## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

a) neutronová aktivační analýza - Neutron activation analysis (NAA)

Problém řešený v roce 1962: byl Napoleon při vyhnanství na Svaté Heleně otráven?



Ve vlasech Napoleona byl zjištěn arzén v koncentraci 13krát vyšší (0,000 15 %).

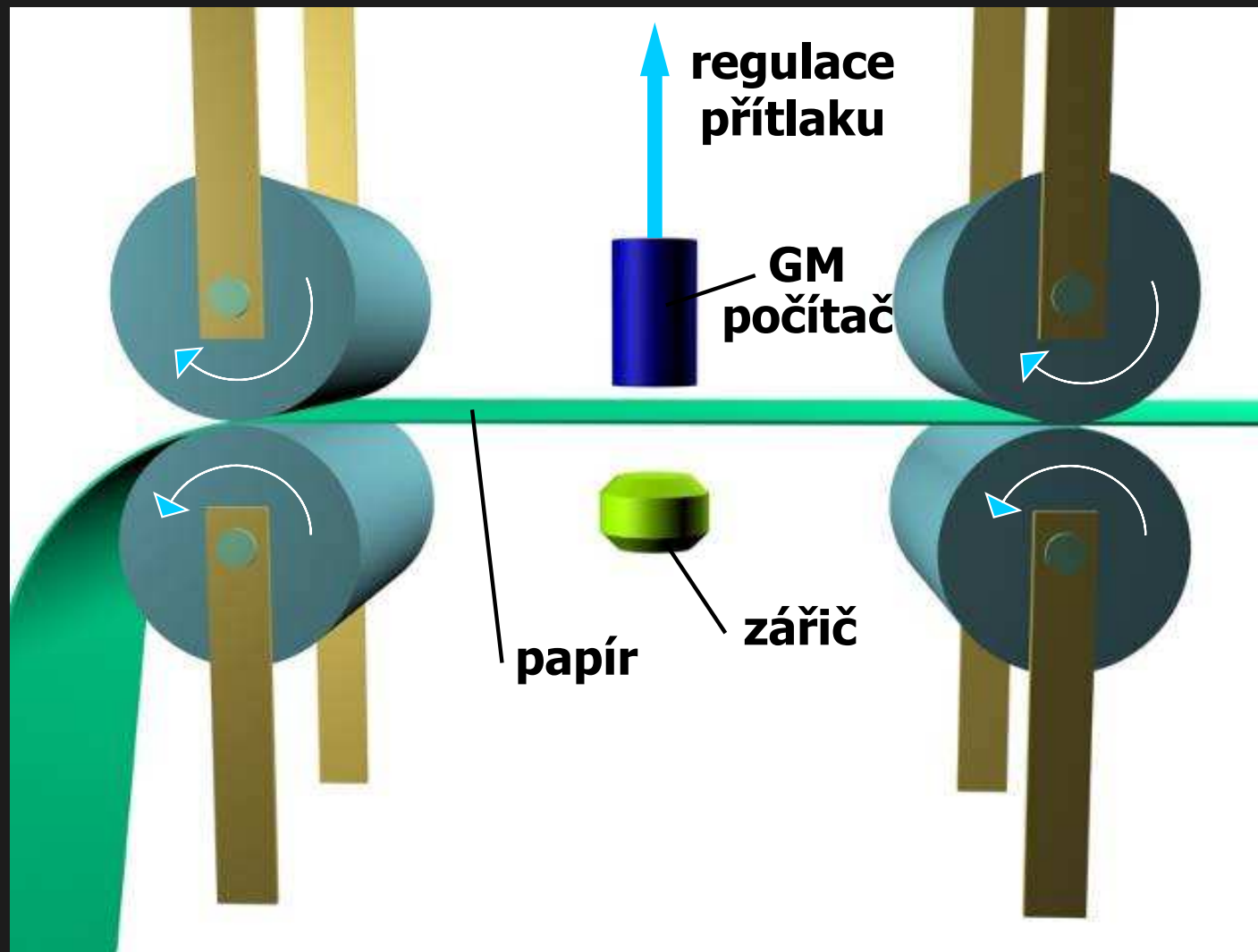
*-vražda? tapety?*

## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### b) měření a kontrola tenkých vrstev

využívá se záření  $\alpha$  nebo  $\beta$ : zářič je na jedné straně kontrolovaného materiálu (papír, látka, plech, ...), na druhé straně je detektor; ve zpětné vazbě se ovládá výrobní zařízení

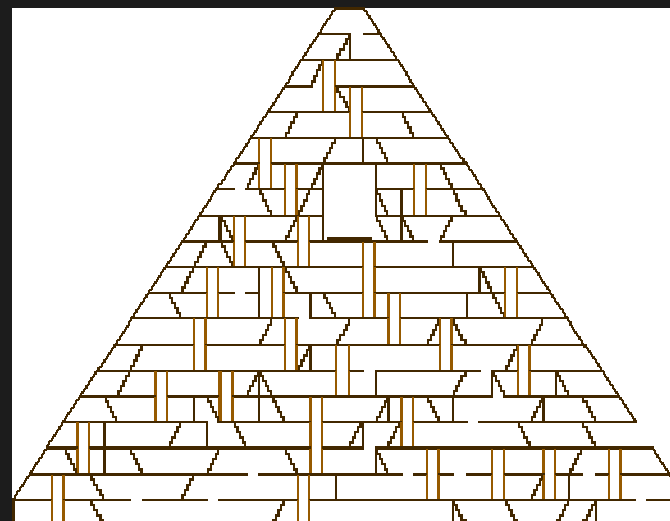
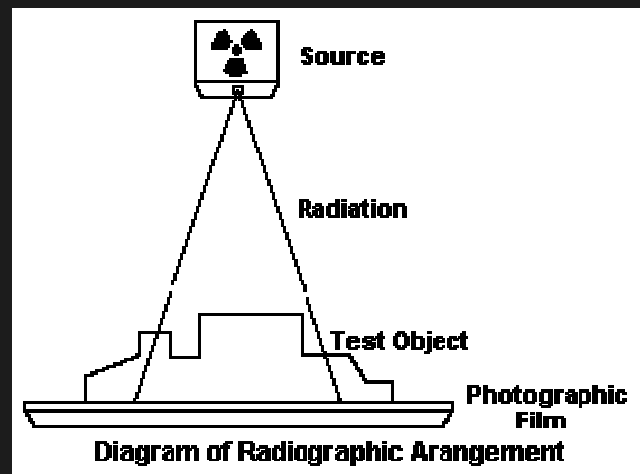


## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### c) defektoskopie

využívá se záření  $\gamma$ , případně neutronů, prozařují se velké vrstvy materiálu (silné ocelové odlitky, pyramidy)



## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### d) Lékařství - diagnostika

Do organismu se vpraví malé množství radioaktivního nuklidu s velmi krátkým poločasem rozpadu (minuty, hodiny). Sleduje se cesta nuklidu organismem, rychlost metabolismu, ukládání prvků v orgánech. Některé patologické struktury pak koncentrují zvolenou kontrastní látku, která je pak na snímku zdůrazněna.

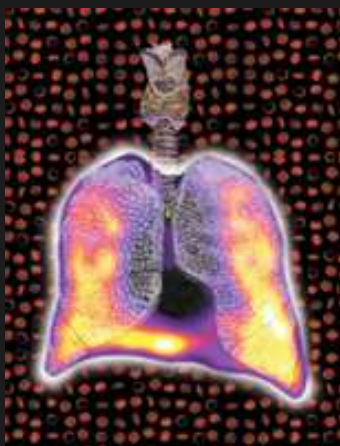
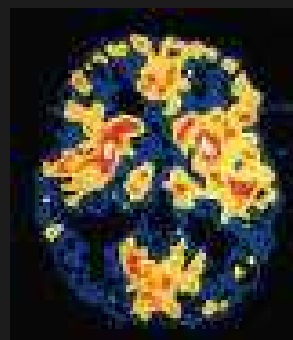
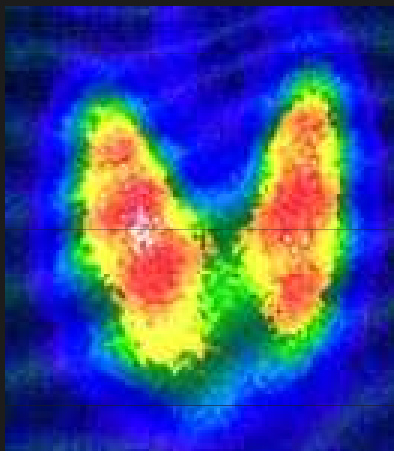
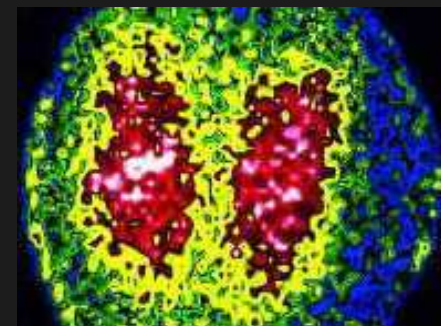


diagram plic po  
vdechnutí  
radioaktivního aerosolu  
s techneciem 99

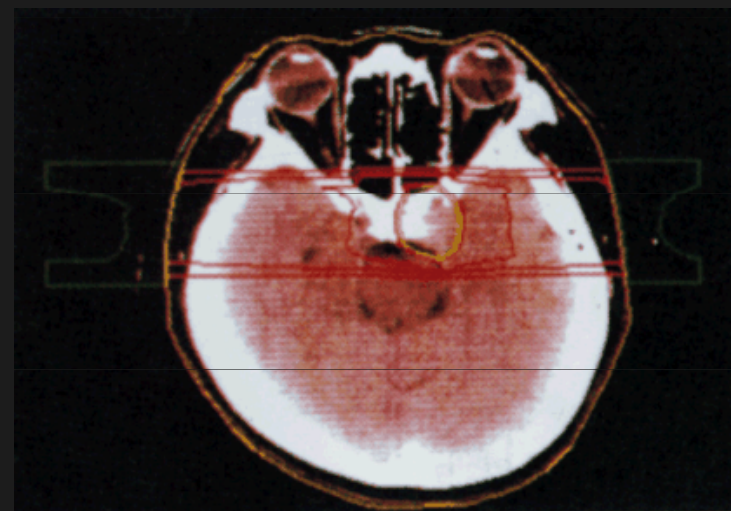


mozek s  
tumorem

Alzheimerova  
choroba



sledování ukládání  
derivátů mastných  
kyselin v myokardu

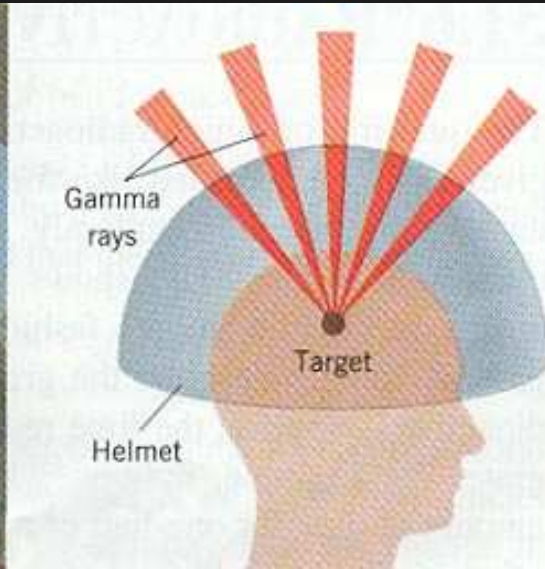
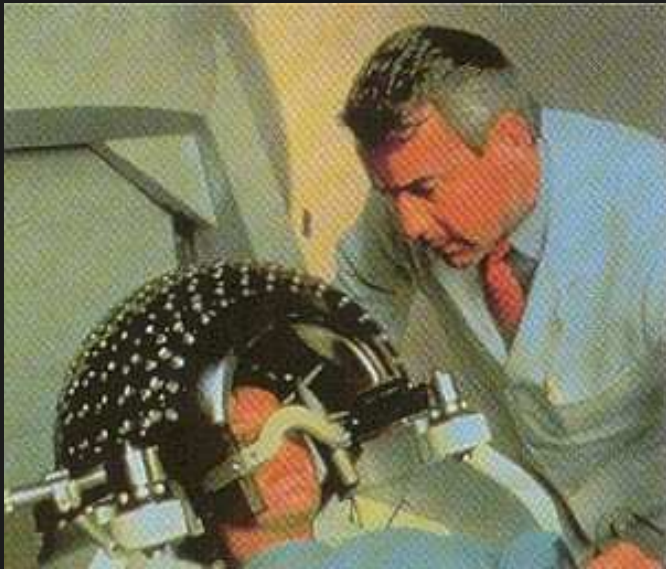


## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### e) Lékařství - terapie

je založena na možnosti směrování paprsku radioaktivního záření, či na jeho omezeném doletu, případně na schopnosti většího zachycení záření v postižené tkáni



princip Leksellova gama nože



příklady zařízení pro směrové ozařování

## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### e) lékařství - terapie



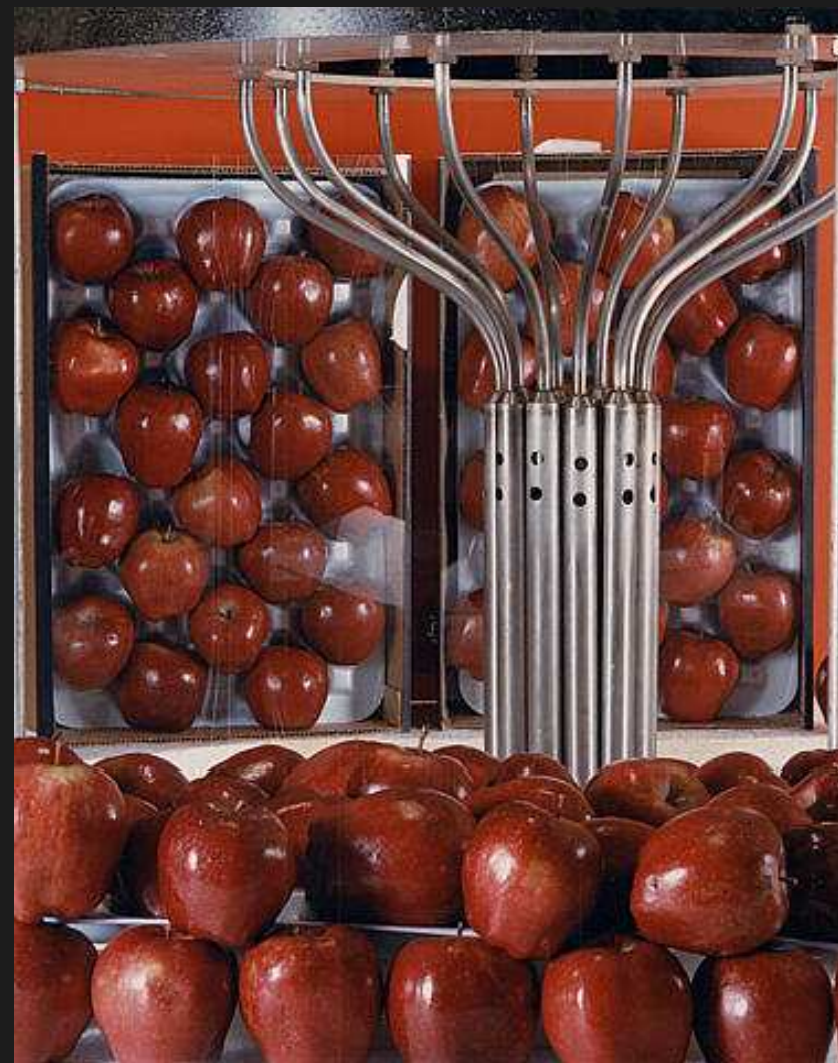
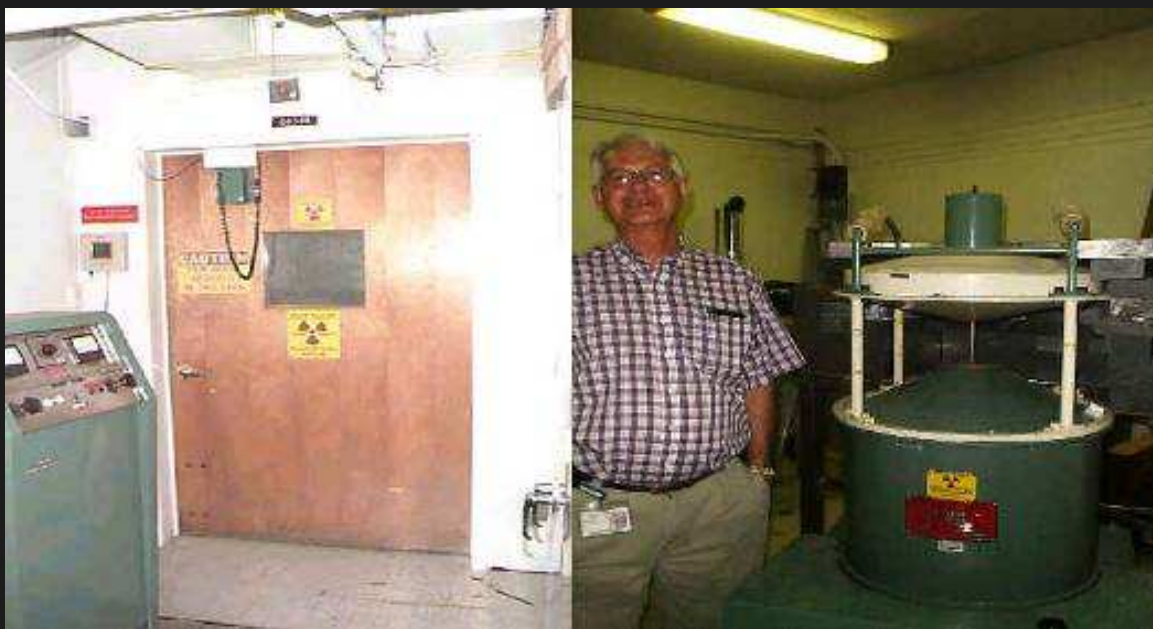
lineární urychlovač

## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### f) sterilizace a konzervace

využívá se hlavně záření  $\gamma$  ( $\text{Co60}$ ) proti mikrobům, škůdcům (červotoč), plísním, kvasinkám, zabraňuje se kažení potravin, klíčení brambor apod.



## **5. Radioaktivita**

### **5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky**

#### **g) biologie, chemie – metoda značených atomů**

**Je obdobná lékařské diagnostice: do organismu nebo do chemické reakce se místo běžného izotopu vpraví radioizotop, sleduje se cesta organismem, chemickou reakcí (chemie jednoho atomu). V biologii se zkoumá metabolismus, ukládání stopových prvků, v chemii se zkoumá struktura molekul, průběhy chemických reakcí.**



## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### h) archeologie

Využívá několika radionuklidů, které vznikají v přírodě a ukládají se v určitých strukturách. Nejznámějším je příklad radiouhlíku C 14 s poločasem rozpadu 5720 let. Ten vzniká v atmosférickém CO<sub>2</sub> a dostává se do živých organismů – u rostlin asimilací, u živočichů po jídání rostlin, či živočichů živících se rostlinami. Po odumření organismu se začíná radiouhlík rozpadat a jeho množství v pozůstatcích klesá. Z poměru C14 a C12 lze určit, před kolika lety organismus odumřel.



V Alpách byly nalezeny pozůstatky „ledového muže“. Normální obsah C14 je 0,23 Bq na 1 gram. V ledovém muži byla aktivita jen 0,121 Bq na 1 gram, tedy asi polovina aktivity živého organismu. Z toho plyne, že ledový muž zahynul přibližně před 5700 lety.

## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### h) archeologie



Turínské plátno, do kterého by měla být údajně zahalena mrtvola Ježíše Krista po sejmutí z kříže. V roce 1988 bylo zkoumáno radiouhlíkovou metodou a bylo zjištěno, že je staré 608-728 let, tj. z let 1260 až 1360. V této době se o Turínském plátně poprvé psalo. Zastánci pravosti tvrdí, že radiouhlík se v plátně obnovil zachycením sazí při požáru z uvedených let.

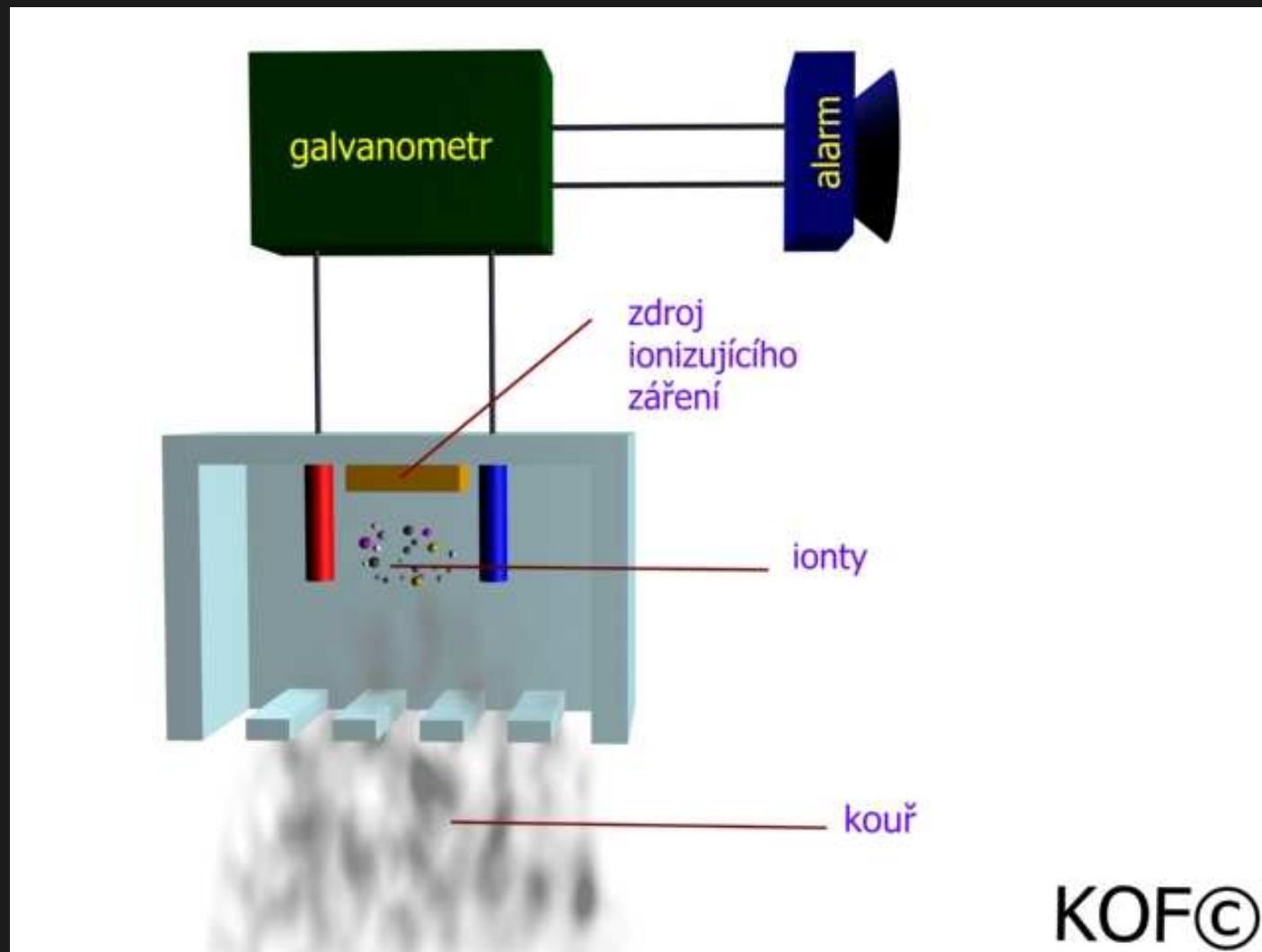
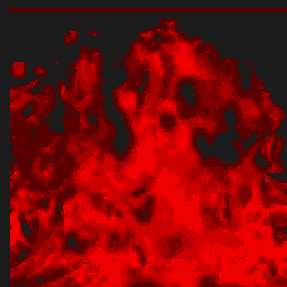


U fosilií starých například 80 milionů let není radiouhlíková metoda využitelná.

## 5. Radioaktivita

### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

#### i) detektory kouře a ohně



## 5. Radioaktivita

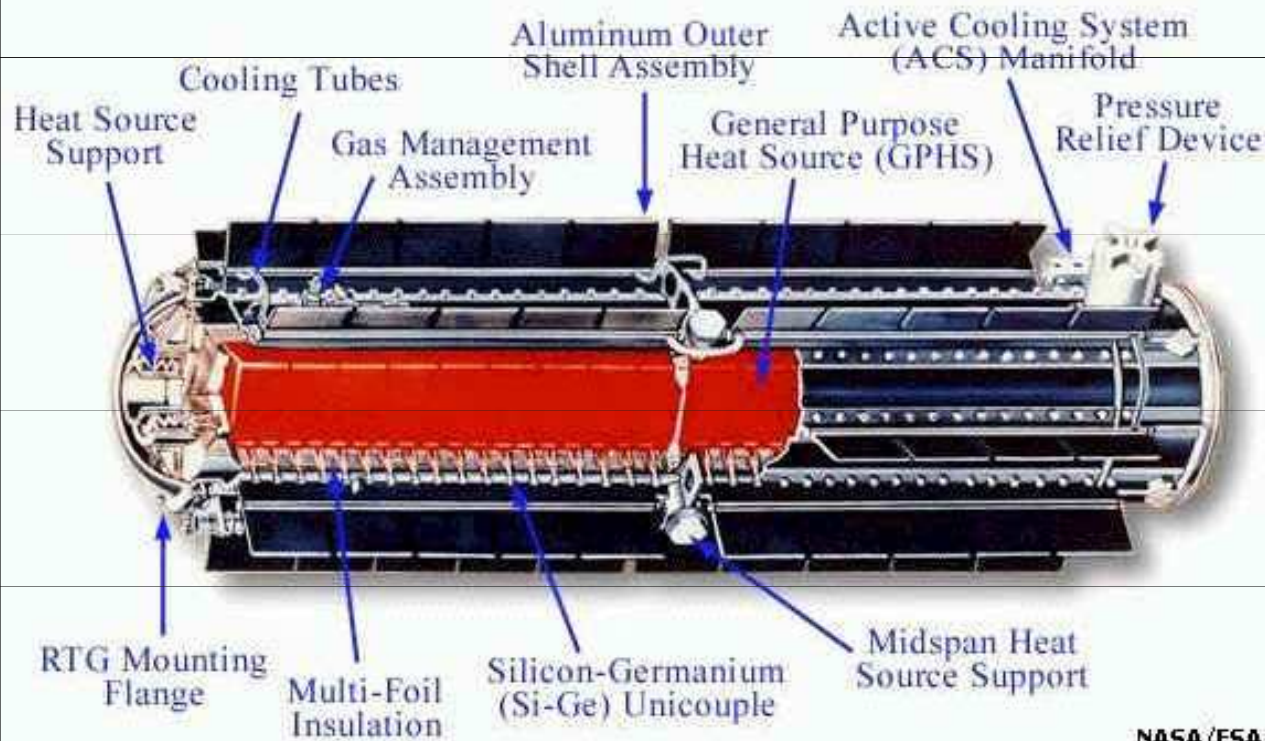
### 5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky

j) zdroje energie



170 gramů plutonia rozžhavených teplem uvolňovaným při radioaktivním rozpadu v grafitovém držáku

### GPHS-RTG



Jaderná baterie pro kosmický výzkum – elektrická energie se uvolňuje termoelektrickým jevem z rozdílu teplot: radioaktivní látka izolovaná uvnitř válce – vnější chladiče. Jako termočlánky slouží polovodičové spoje Si-Ge. Poskytuje výkon 628 W po 11 letech (sonda Cassini-Huygens)

## **5. Radioaktivita**

### **5. 10. Využití radioaktivity a fyziologické účinky**

#### **k) zemědělství**

**šlechtitelství: k vyvolání mutací u rostlin a živočichů – ustupuje cílenému genovému inženýrství**

**zjišťování vlhkosti obilí na vjezdu do silových skladišť**