C1800
Chemie pro fyzikální obory:
Podklady k první přednášce

Döbereiner, Johann: 1829 Zákon triád. *Jak asi zněl?*

	PRVEK	SYMBOL	AT. HMOTNOST
1	Lithium	Li	6.9
	Sodík	Na	23
	Draslík	K	39
2	Vápník	Ca	40.1
	Stroncim	Sr	87.6
	Baryum	Ba	137.3
3	Chlor	Cl	35.5
	Brom	Br	79.9
	Jód	I	126.9
4	Síra	S	32
	Selen	Se	79
	Tellur	Te	128

Dobereinerovy triády

$$\left.\begin{array}{ll} Li & 7 \\ Na & 23 \\ K & 39 \end{array}\right] \rightarrow \frac{7+39}{2} = 23$$

$$\left.\begin{array}{ll} Ca & 40 \\ Sr & 87 \\ Ba & 137 \end{array}\right] \rightarrow \frac{40+137}{2} = 88.5$$

$$\left.\begin{array}{ll} P & 31 \\ As & 75 \\ Sb & 122 \end{array}\right] \rightarrow \frac{31+122}{2} = 76.5$$

$$\left.\begin{array}{ll} Cl & 35.5 \\ Br & 80 \\ I & 127 \end{array}\right] \rightarrow \frac{35.5+127}{2} = 81.25$$

John Newlands, 1864, zákon oktáv

	No.		No.		No.		No.		No.		No.		No.		No.
H	1	F	8	Cl	15	Co & Ni	22	Br	29	Pd	36	I	42	Pt & Ir	50
Li	2	Na	9	K	16	Cu	23	Rb	30	Ag	37	Cs	44	Os	51
G	3	Mg	10	Ca	17	Zn	24	Sr	31	Cd	38	Ba & V	45	Hg	52
Bo	4	Al	11	Cr	19	Y	25	Ce & La	33	U	40	Ta	46	Tl	53
C	5	Si	12	Ti	18	In	26	Zr	32	Sn	39	W	47	Pb	54
N	6	P	13	Mn	20	As	27	Di & Mo	34	Sb	41	Nb	48	Bi	55
O	7	S	14	Fe	21	Se	28	Ro & Ru	35	Te	43	Au	49	Th	56

John Newlands, 1864, zákon oktáv

	No.		No.		No.		No.		No.		No.		No.		No.
H	1	F	8	Cl	15	Co & Ni	22	Br	29	Pd	36	I	42	Pt & Ir	50
Li	2	Na	9	K	16	Cu	23	Rb	30	Ag	37	Cs	44	Os	51
G	3	Mg	10	Ca	17	Zn	24	Sr	31	Cd	38	Ba & V	45	Hg	52
Bo	4	Al	11	Cr	19	Y	25	Ce & La	33	U	40	Ta	46	Tl	53
C	5	Si	12	Ti	18	In	26	Zr	32	Sn	39	W	47	Pb	54
N	6	P	13	Mn	20	As	27	Di & Mo	34	Sb	41	Nb	48	Bi	55
O	7	S	14	Fe	21	Se	28	Ro & Ru	35	Te	43	Au	49	Th	56

Skupina IA

Skupina IB

Skup. IIA, G=Be

Skupina IIB

Skupina IIIA

Skup. IIIB+f-prvky

Skupina IVA

Skupina IVB

Skupina VA

Skupina VB

Skupina VIA

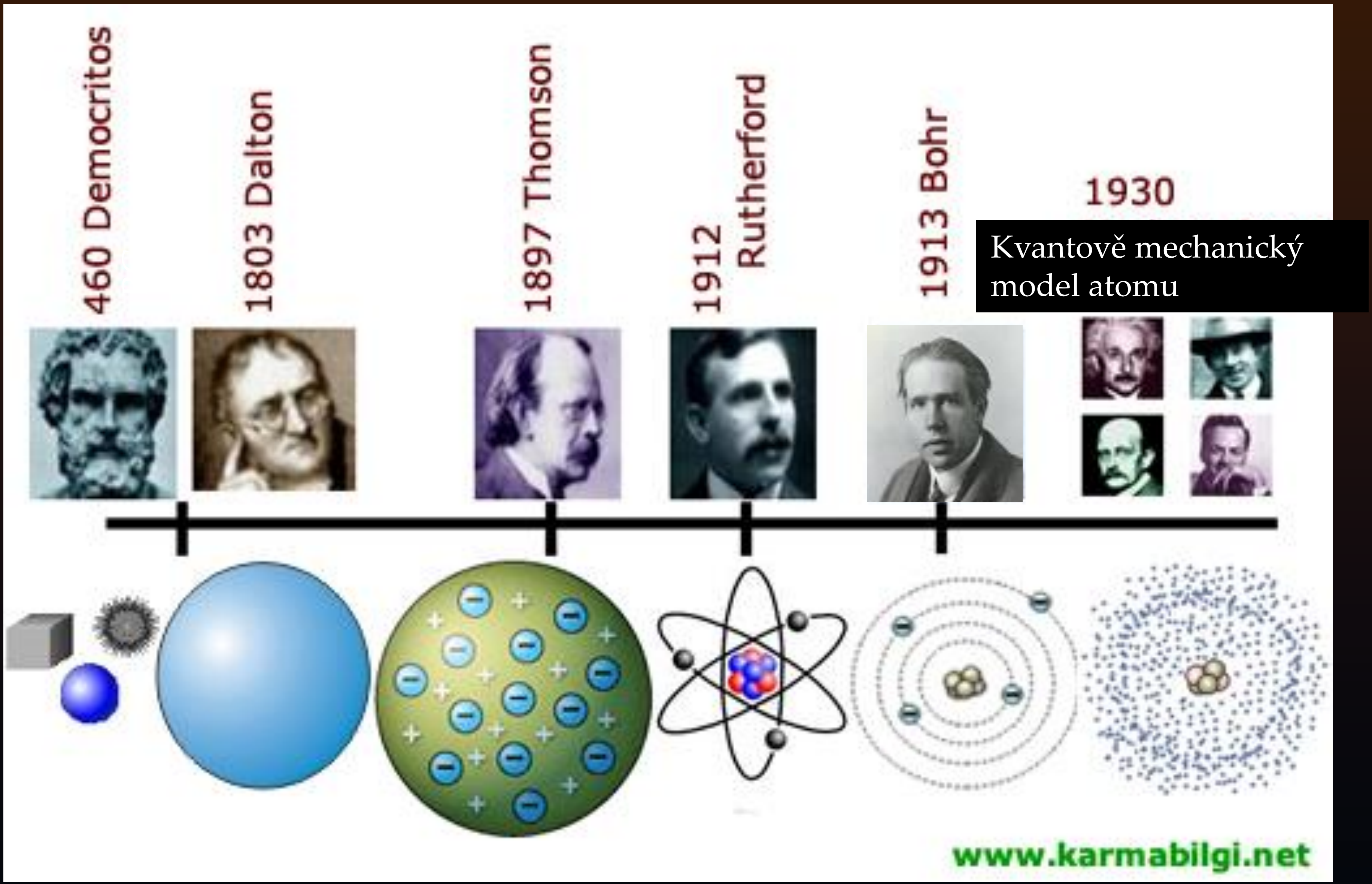
Skup. VIIA, H podobné vlastnosti

Skupina VIIIB

První periodická tabulka: Mendělejev

Group / Period	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
1	H=1							
2	Li=7	Be=9.4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27.3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35.5	
4	K=39	Ca=40	?=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56,Co=59 Ni=59
5	Cu=63	Zn=65	?=68	?=72	As=75	Se=78	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	?Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	?=100	Ru=104,Rh=104 Pd=106
7	Ag=108	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Te=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140				
9								
10			?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184		Os=195,Ir=197 Pt=198
11	Au=199	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208			
12				Th=231		U=240		

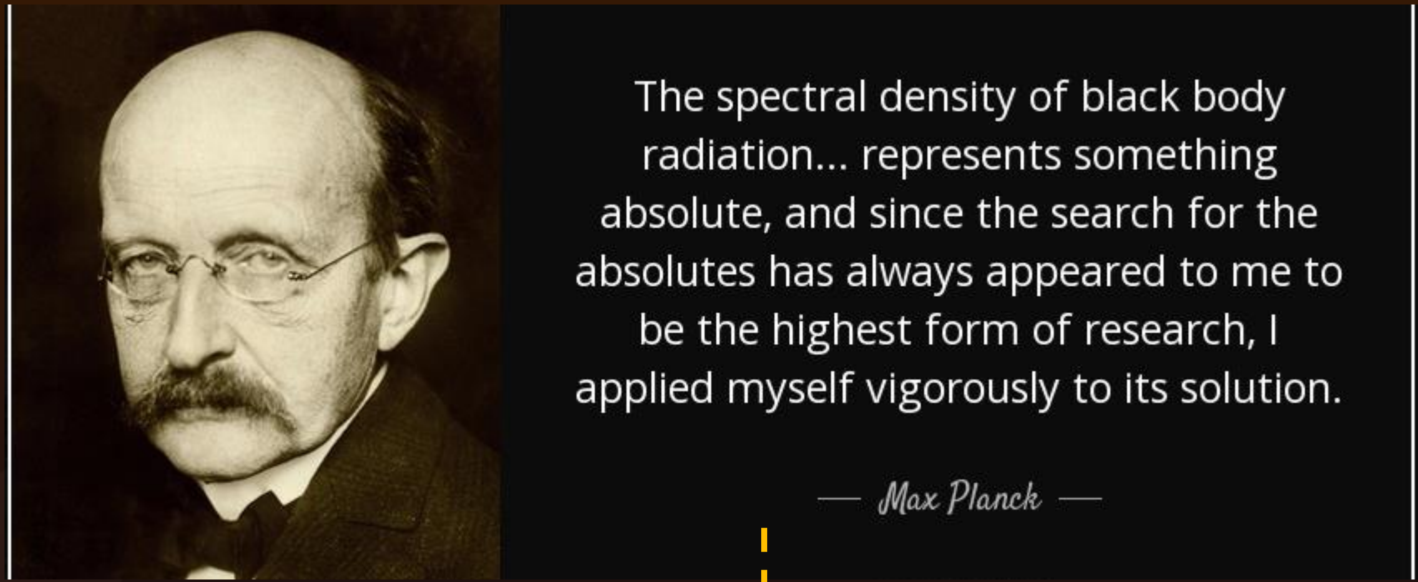
Historie modelu atomu



1.7 Spektrální hustota absolutně černého tělesa

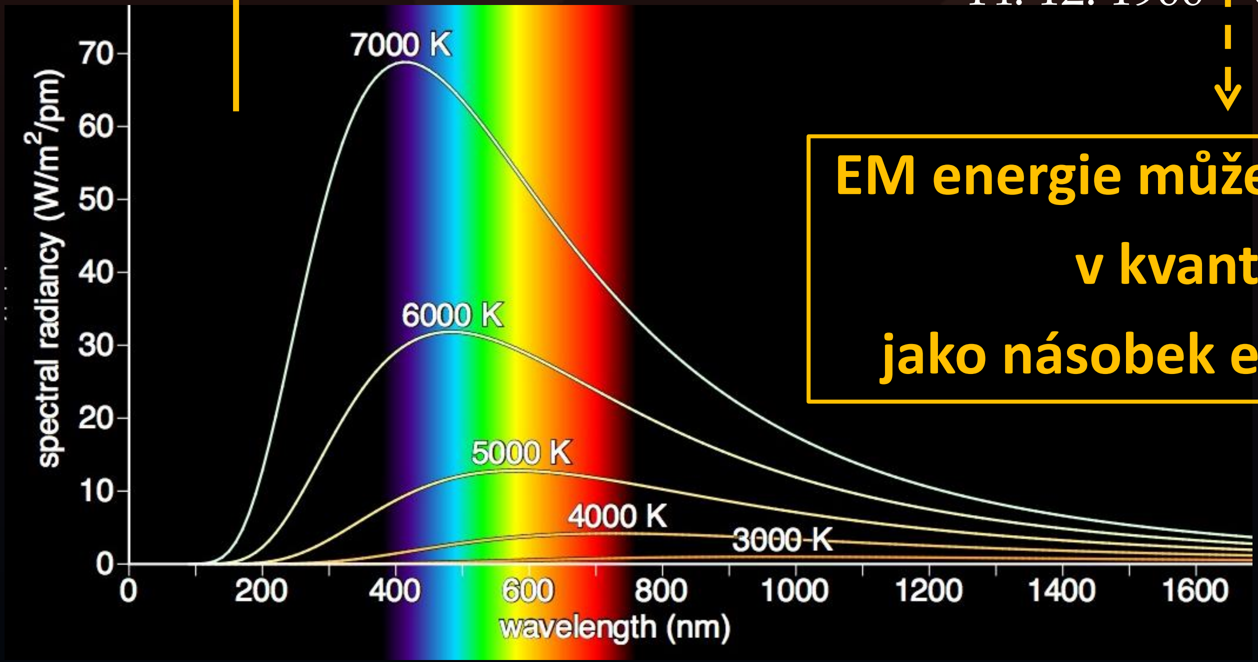
Wienův vyzařovací zákon:

$\lambda_{max} \cdot T = konst$



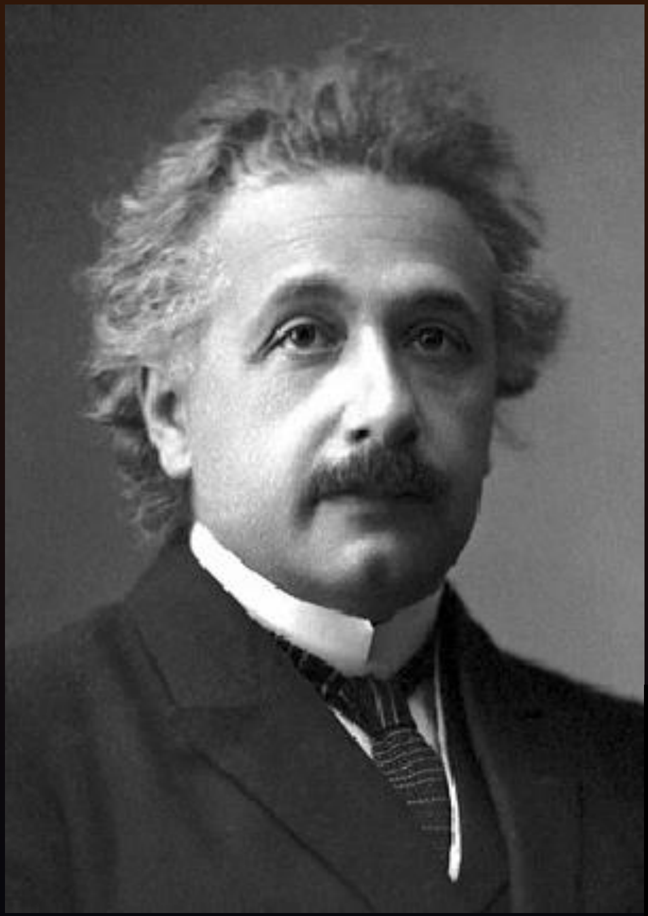
14. 12. 1900 odvození obsahující postulát:

EM energie může být vyzařována pouze v kvantované formě, jako násobek elementární jednotky.

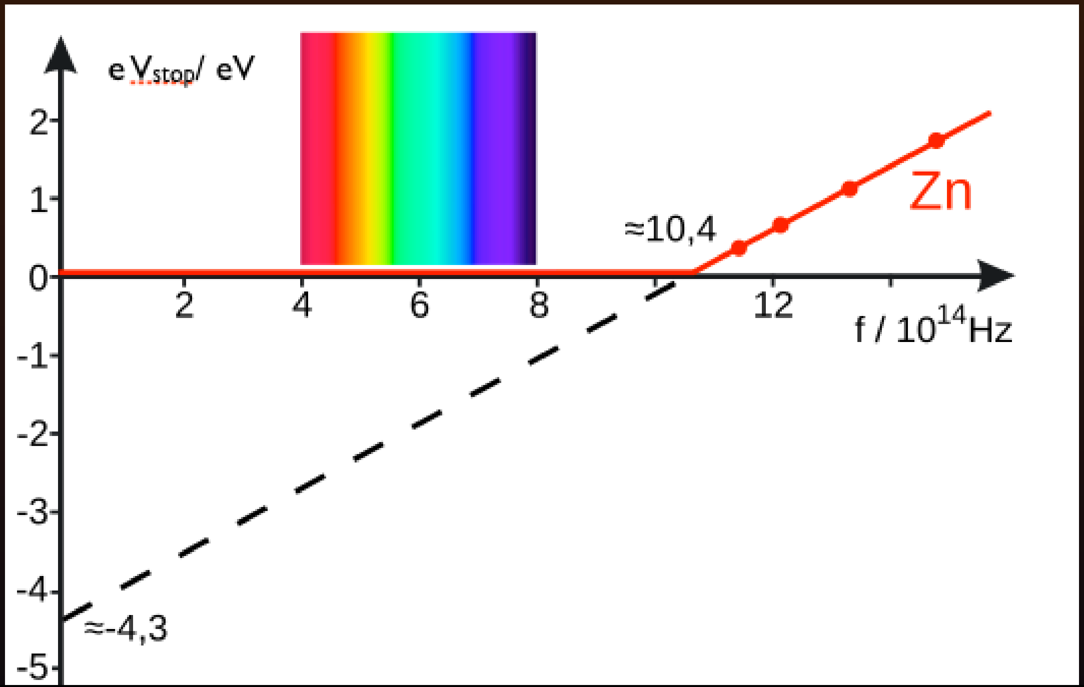


1.8 Částicové vlastnosti EM vln

Proč při interakci kovu s EM zářením dojde k emisi elektronů až od určité hraniční frekvence *v*?



Albert Einstein, 1909



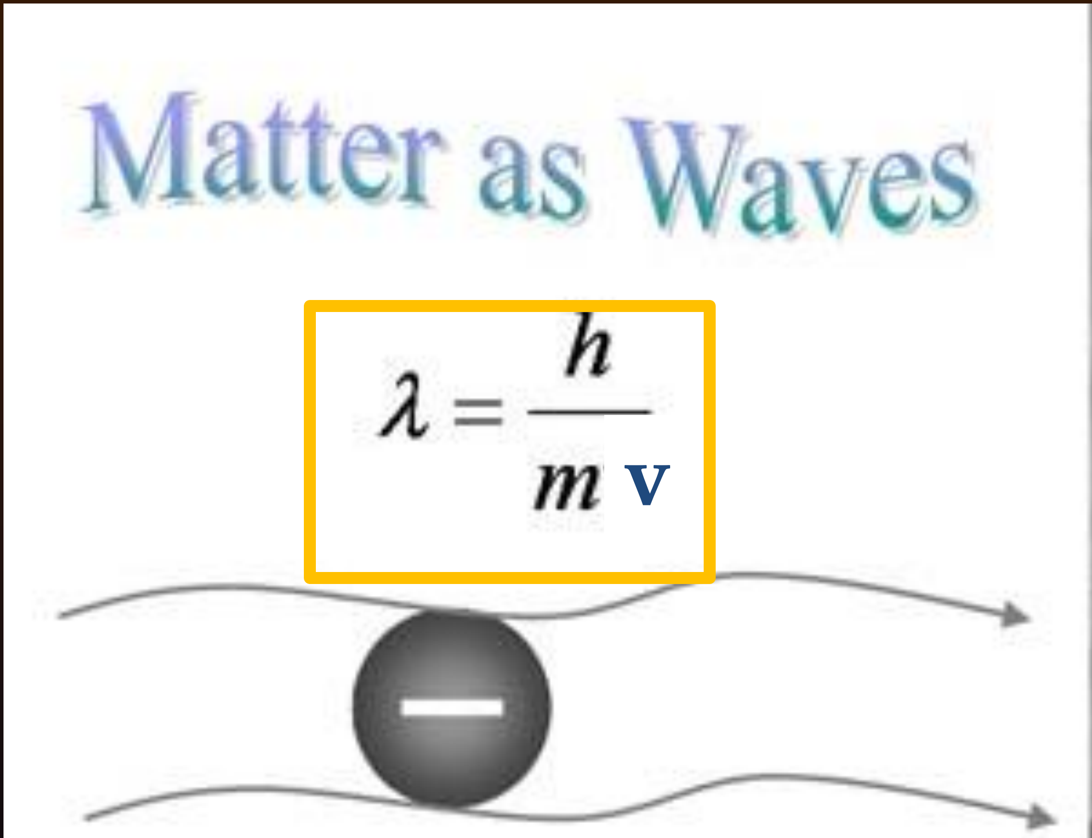
e^- v kovu musí překonat prahovou *E*.

Světlo se chová jako proud tzv. fotonů.

Energie 1 fotonu: $\boxed{E = h \cdot v}$

Jeden e^- interaguje s *jedním* fotonem.

1.9 Vlnové vlastnosti částic



Mají-li vlny vlastnosti částic, mohou i částice mít vlastnosti vln.

Louis de Broglie, 1923

„v“ značí rychlost, nikoli frekvenci !

λ = příslušná vlnová délka, h = Planckova konstanta

Příklad k části 1.9

Vlnová délka částic má jasný smysl
(a lze ji změřit)
při rovnoměrném přímočarém pohybu.

Odvoďte v tomto případě vztah pro výpočet **λ**
z hmotnosti ***m***,
celkové energie ***E***
a potenciální energie ***V***.

de Broglieho vztah

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

$$mv = p = \sqrt{2mT}$$

$$T = E - V$$

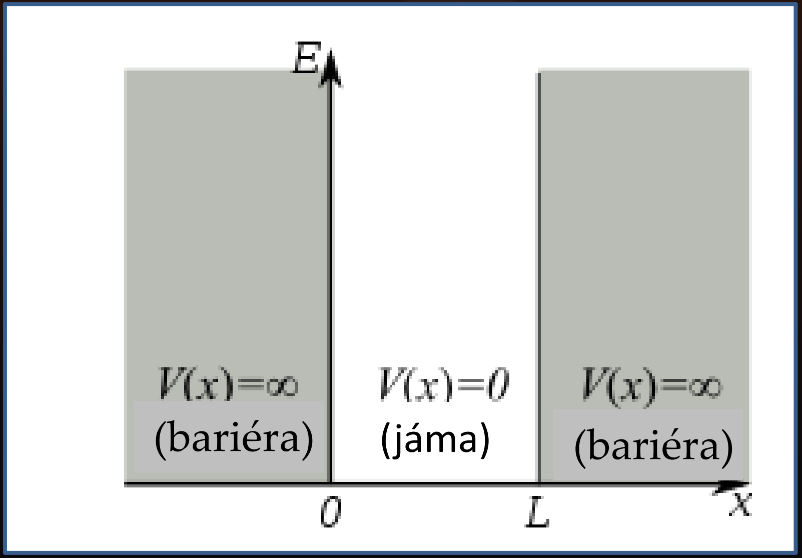
$$mv = p = \sqrt{2m\,(E-V)}$$

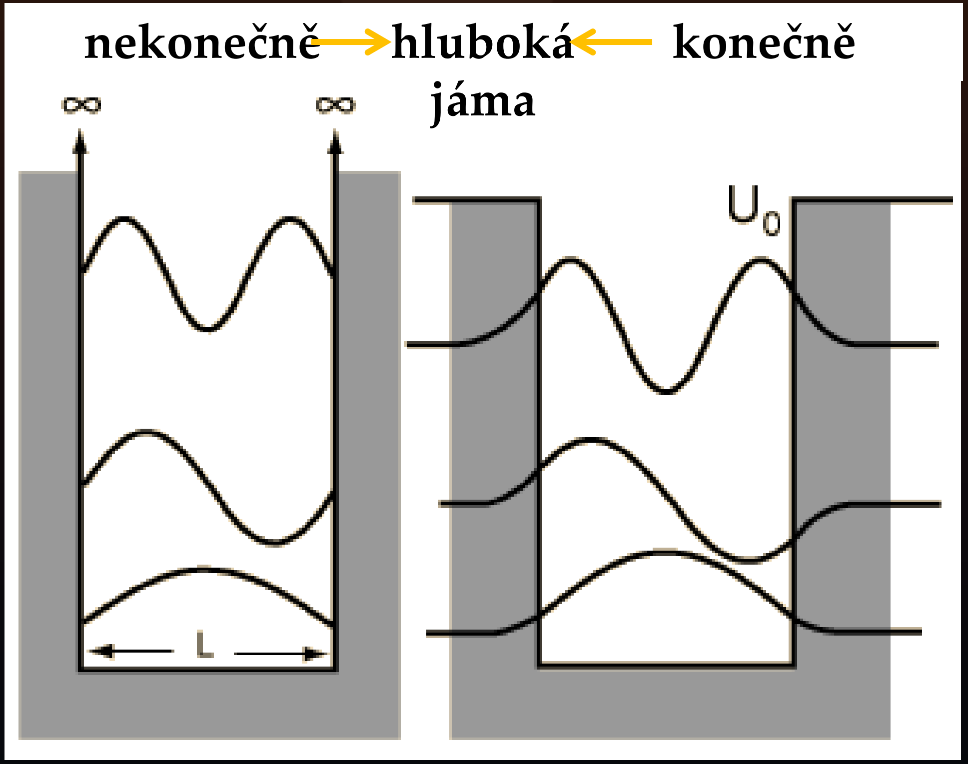
$$\boxed{\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\,(E-V)}}}$$

1.10 Vlnové funkce pro částici v jámě

Chovají-li se částice jako vlny, pozbýváme ostré informace o jejich chování (x, y, z, $p_{x,}$ $p_{y,}$ p_z).

Musí nám stačit spojitý popis = popis pomocí funkcí.





$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

1.11 Jak se vlnové funkce naleznou?

Vlnové funkce pro konkrétním hladiny energie:

Použijeme tzv. operátor energie, tradičně značený $\hat{H}$ (od „Hamiltonův operátor“).

Celková energie částice v jámě klasicky: $E = \frac{p^2}{2m}$

Kvantově: řeším 1 rovnici o 2 neznámých:

Operátor funkci změní na jinou, z ní nějak odvozenou

neznámá energie

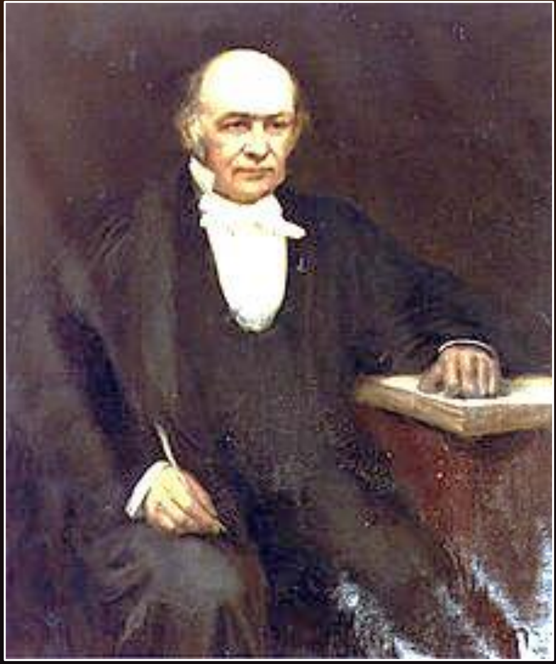
násobení

$$\hat{H}\,\Psi = E \cdot \Psi$$

neznámá funkce

Pro částici v 1-rozměrné jámě: $\hat{H} = -\frac{h}{2\pi m}\frac{d^2}{dx^2}$

Sir William R. Hamilton



1805-1865, Irský M, F a ASTR přeformuloval klasickou mechaniku na abstraktnější úrovni

1.12 Vlastní funkce a hodnoty operátoru

Tj. pro částici v jámě hledám takovou matematickou funkci, která se dvojím derivováním vrátí na svůj původní funkční předpis, až na konstantu.

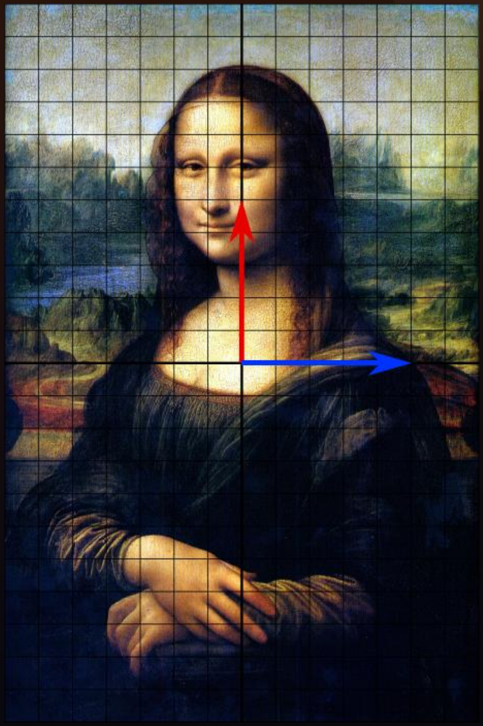
Platí to pro námi nalezené sinusoidy?

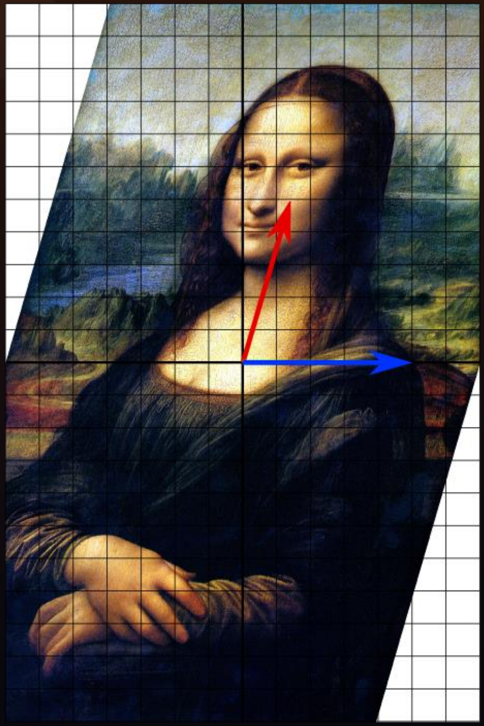
Obecný postup v QM:

1. Napíšu klasický předpis pro výpočet veličiny
2. Z něj vytvořím předpis kvantový , tzv. operátor
3. Najdu funkce, které operátor pouze vynásobí konstantou.

VLASTNÍ FUNKCE OPERÁTORU

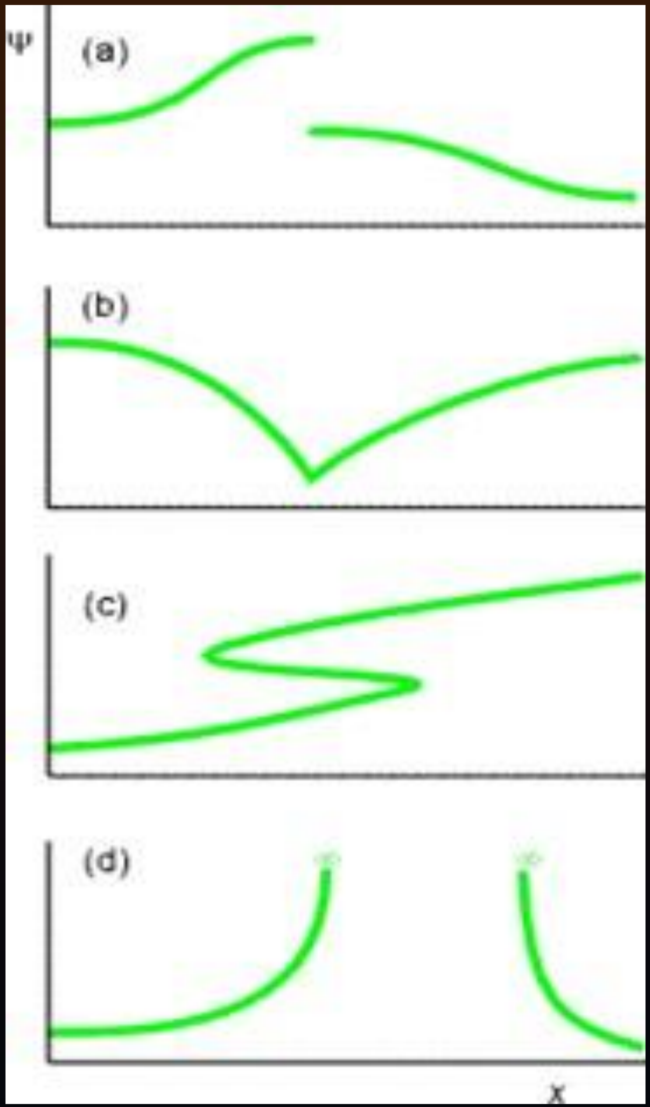
VLASTNÍ HODNOTY VELIČINY





1.13 Chybějící rovnice do soustavy s neznámými Ψ a E:

Vlastnosti tzv. $fyzikálně\ přijatelné\ vlnové\ funkce$



Spojitost

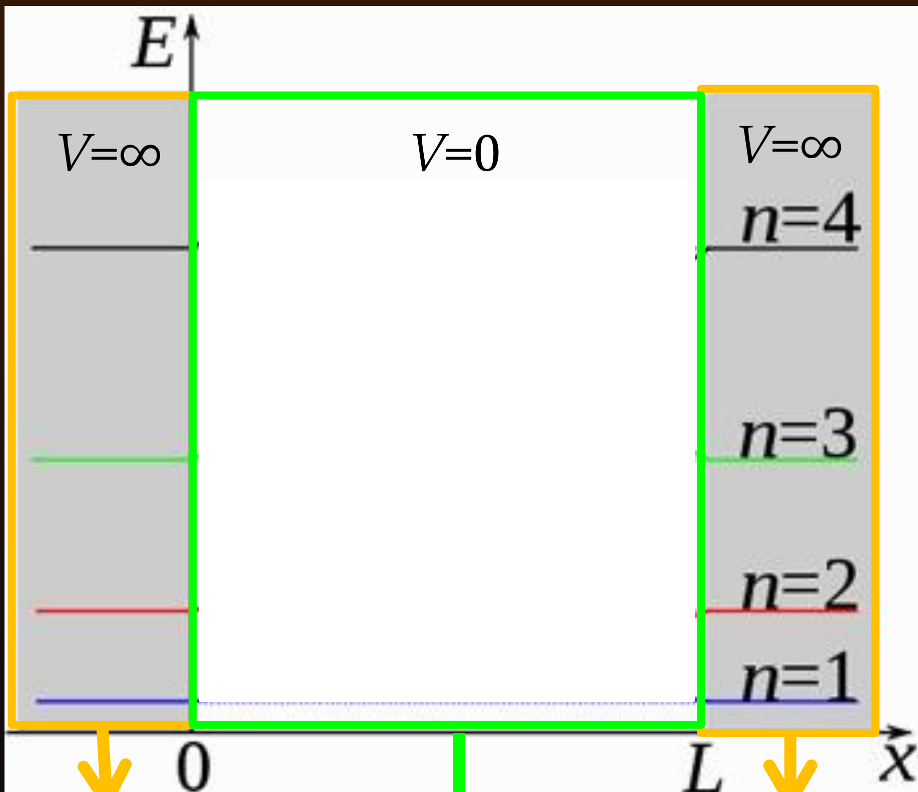
Spojitost 1. derivace až na výjimky (singularity)

Jednoznačnost

Integrovatelnost druhé mocniny (kvadrátu)

1.14 Fyzikální přijatelnost Ψ pro částici v jámě

Zakřivení vlnové funkce: míra E_{kin}



$16\ E_{kin}$

$9\ E_{kin}$

$4\ E_{kin}$

$1\ E_{kin}$

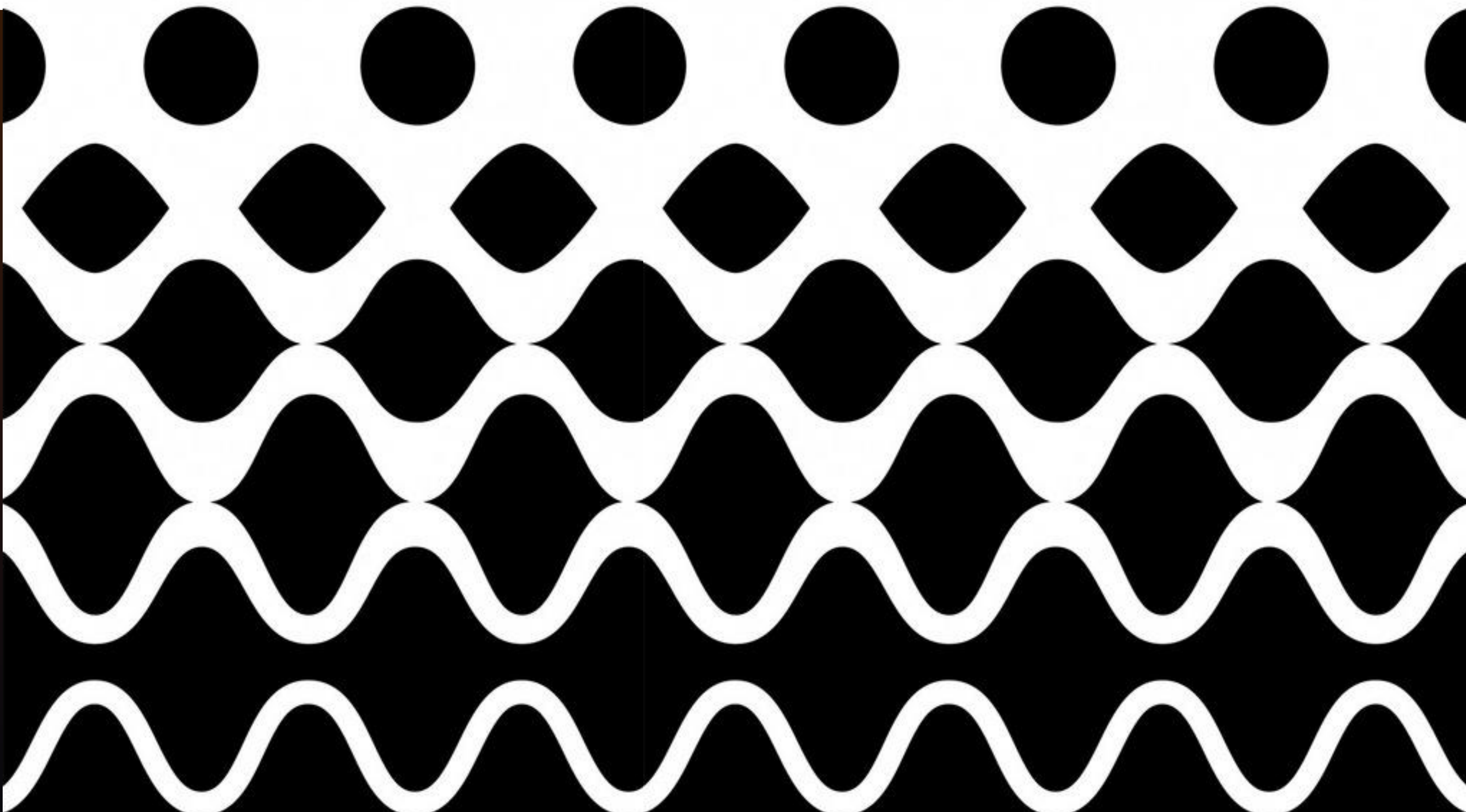
Ψ=0 (energeticky nedostupná oblast)

Odněkud vím, že řešením v této oblasti bude lin. kombinace **sin x** a **cos x**.

Neznám ale periodu.

Který požadavek na fyzikální přijatelnost mi ji pomůže určit?

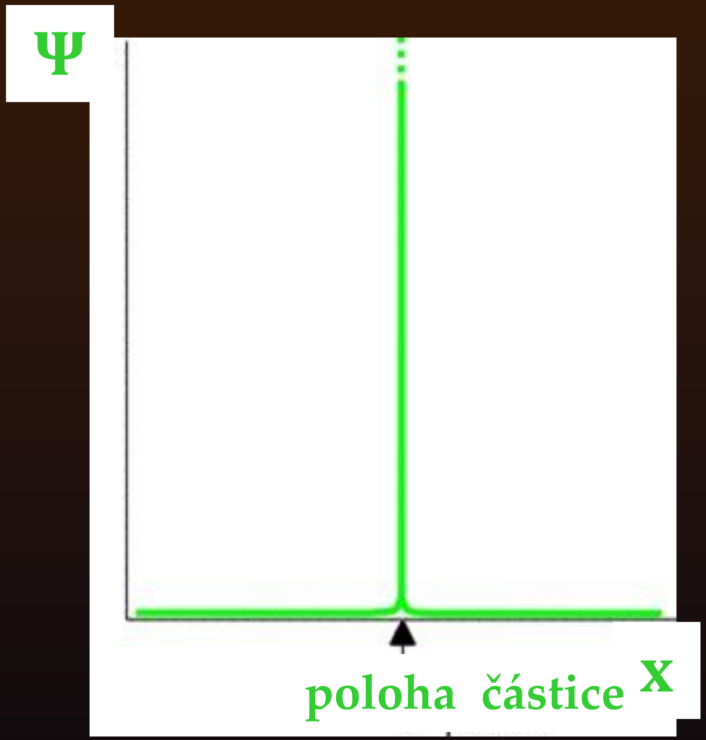
Částicový pohled lze získat i z vln!



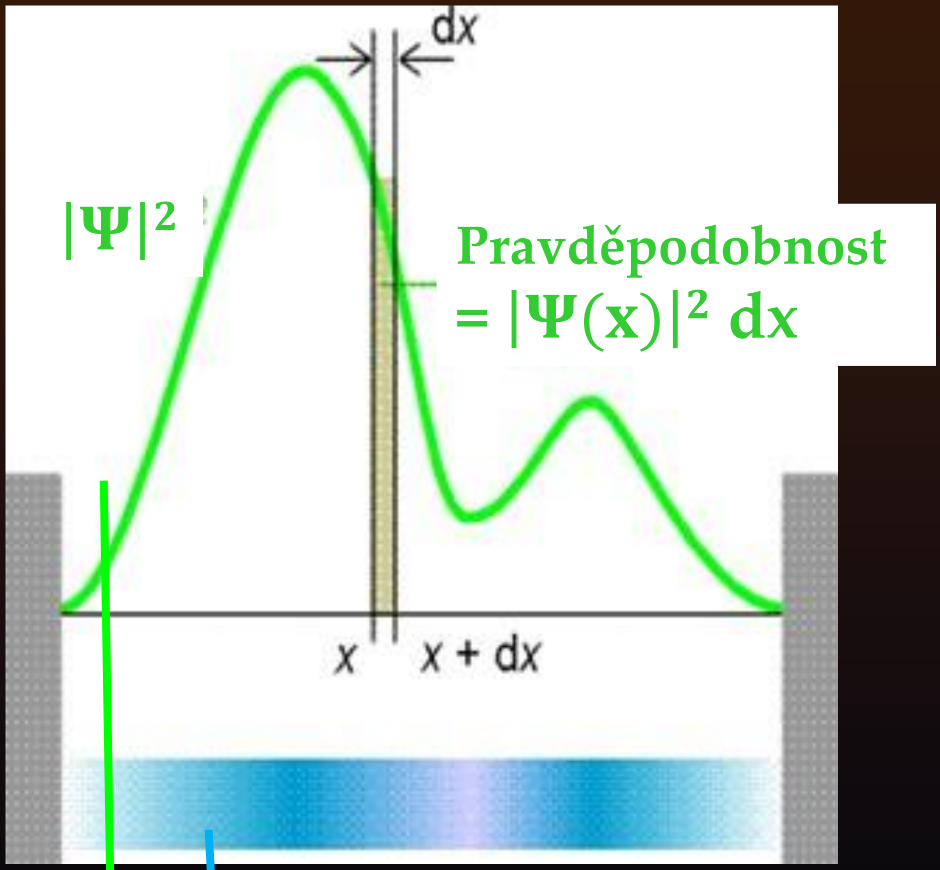
Artist’s impression, inspired by the work of the M. C. Escher, of the continuous morphing between particle- and wave-like behaviour of light.

CREDIT: N.Brunner and J.E. Simmonds

1.15 Vlnová funkce & poloha částice



Vlnová funkce částice
s určitou polohou
(za cenu zcela neurčité
hybnosti)



Kdyby hodnota **Ψ** byla vždy reálné číslo,
stačil by kvadrát bez absolutní hodnoty.

HUSTOTA pravděpodobnosti
výskytu částice

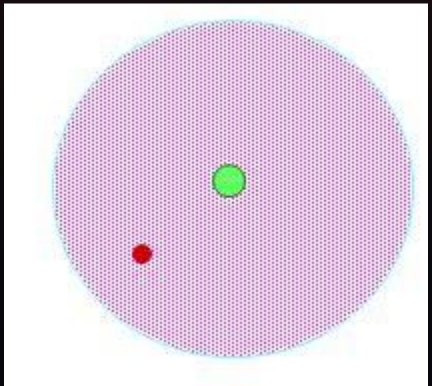
1.16 Pojem Atomového Orbitalu (AO)

Atomový orbital = vlnová funkce pro 1 elektron
≠ hustota elektronu (např. proto, že **Ψ** obecně nabývá komplexních hodnot)

Tím tedy máme definovány AO pro systémy H, He^{+}, Li^{2+}, …

Atomový orbital pro víceelektronové systémy:
pojem založen na aproximaci autorů Douglas Hartree + Vladimir Fock

Vybraný e^- interaguje s časově zprůměrovano u hustotou ostatních e^-



Skutečnost:

Znevýhodnění Zvýhodnění