

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

$$\begin{array}{l} \text{Li} \quad 7 \\ \text{Na} \quad 23 \\ \text{K} \quad 39 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{Li} \\ \text{Na} \\ \text{K} \end{array}} \right\} \rightarrow \frac{7 + 39}{2} = 23$$

$$\begin{array}{l} \text{Ca} \quad 40 \\ \text{Sr} \quad 87 \\ \text{Ba} \quad 137 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{Ca} \\ \text{Sr} \\ \text{Ba} \end{array}} \right\} \rightarrow \frac{40 + 137}{2} = 88.5$$

$$\begin{array}{l} \text{P} \quad 31 \\ \text{As} \quad 75 \\ \text{Sb} \quad 122 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{P} \\ \text{As} \\ \text{Sb} \end{array}} \right\} \rightarrow \frac{31 + 122}{2} = 76.5$$

$$\begin{array}{l} \text{Cl} \quad 35.5 \\ \text{Br} \quad 80 \\ \text{I} \quad 127 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{Cl} \\ \text{Br} \\ \text{I} \end{array}} \right\} \rightarrow \frac{35.5 + 127}{2} = 81.25$$

John Newlands, 1864, zákon oktáv

No.	No.	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.	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	Ca 44	Os 51	
B 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	Pt 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

Skupina VA

Skupina VB

Skup. IIA, G=Be

Skupina IIB

Skupina VIA

Skupina IIIA

Skup. IIIB+f-prvky

Skup. VIIA,
H podobné
vlastnosti

Skupina IVA

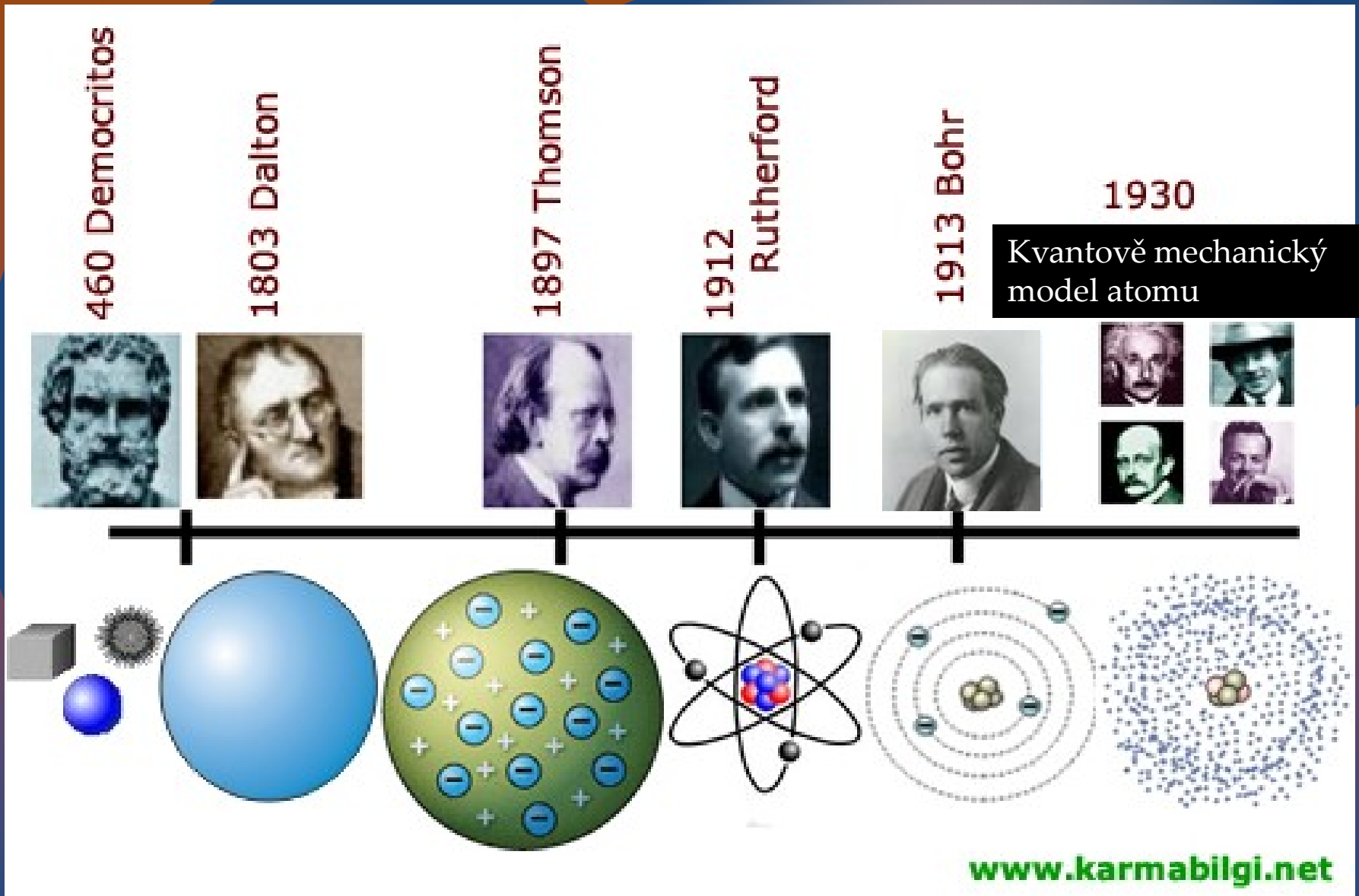
Skupina IVB

Skupina VIIB

První periodická tabulka: Mendělejev

Group	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Period 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		

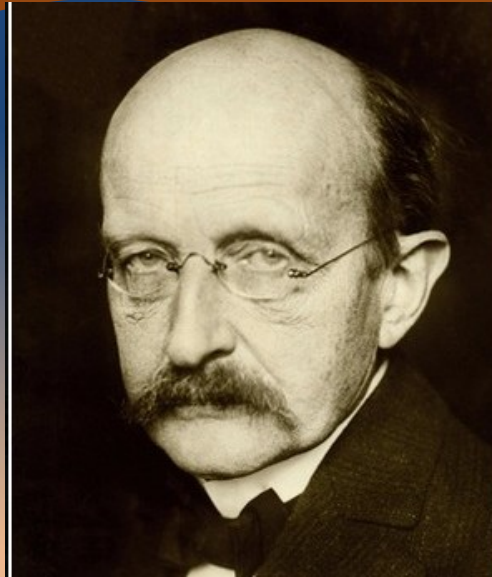
Historie modelu atomu



1.7 Spektrální hustota absolutně černého tělesa

Wienův
vyzařovací zákon:

$$T = \text{konst}$$

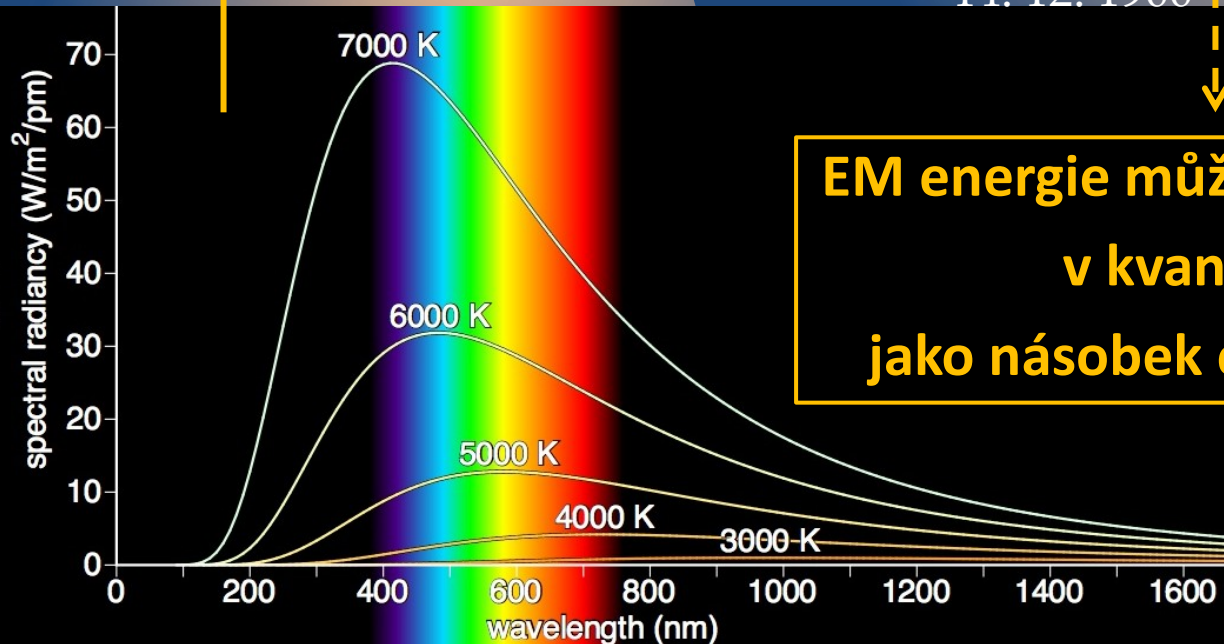


The spectral density of black body radiation... represents something absolute, and since the search for the absolutes has always appeared to me to be the highest form of research, I applied myself vigorously to its solution.

— Max Planck —

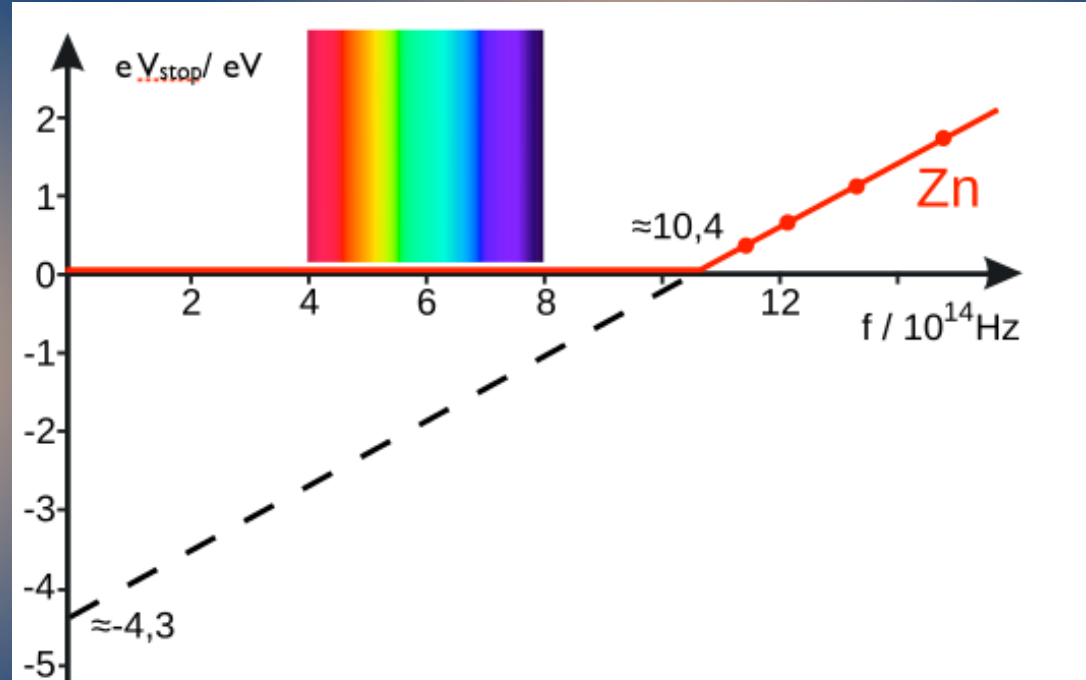
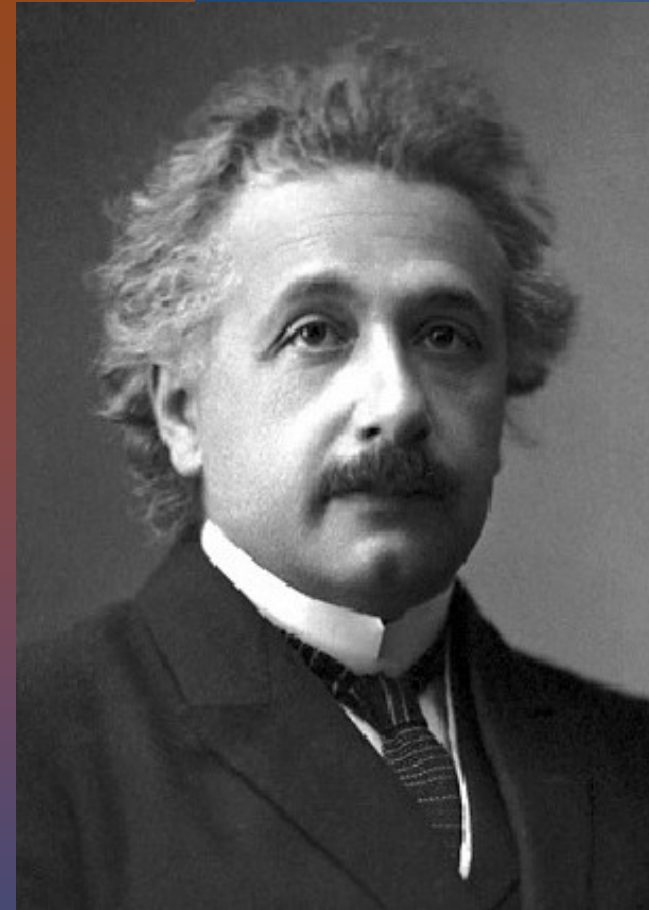
14. 12. 1900 odvození obsahující postulát:

**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 ν ?



e^- v kovu musí překonat prahovou E .
Světlo se chová jako proud tzv. fotonů.

Energie 1 fotonu: $E = h \cdot \nu$

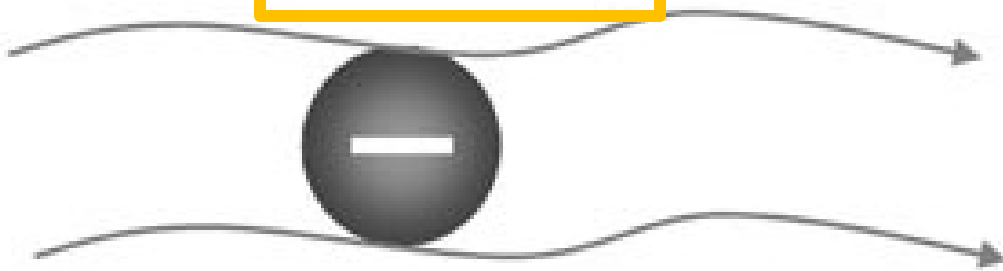
Jeden e^- interaguje s *jedním* fotonem.

Albert Einstein, 1909

1.9 Vlnové vlastnosti částic

Matter as Waves

$$\lambda = \frac{h}{m v}$$



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.

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

de Broglieho vztahu

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

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

$$T = E - V$$

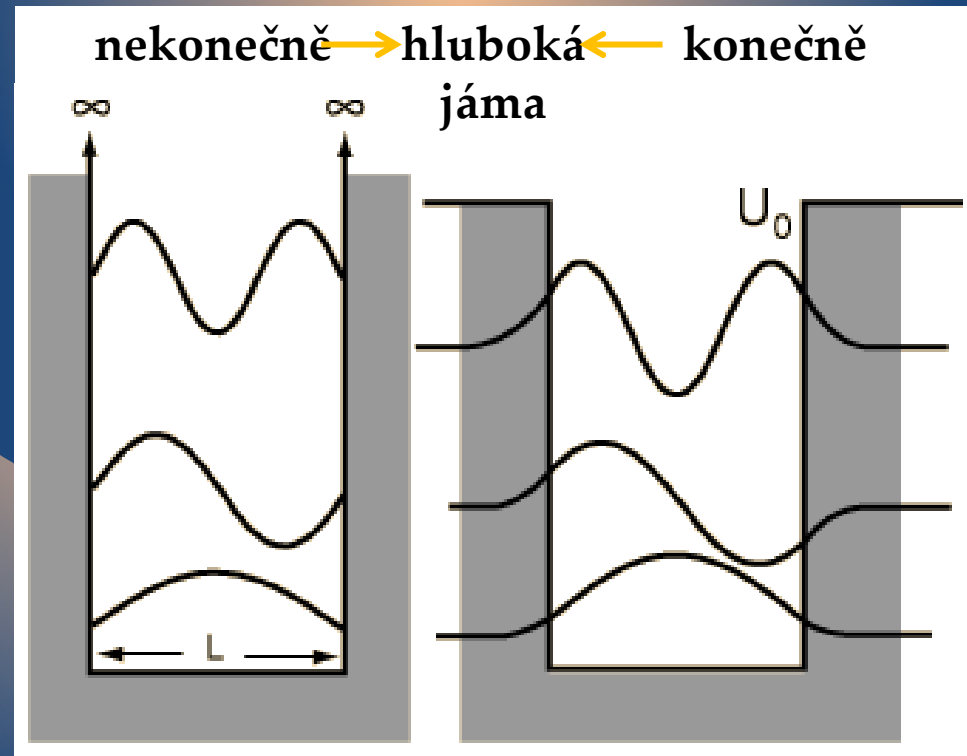
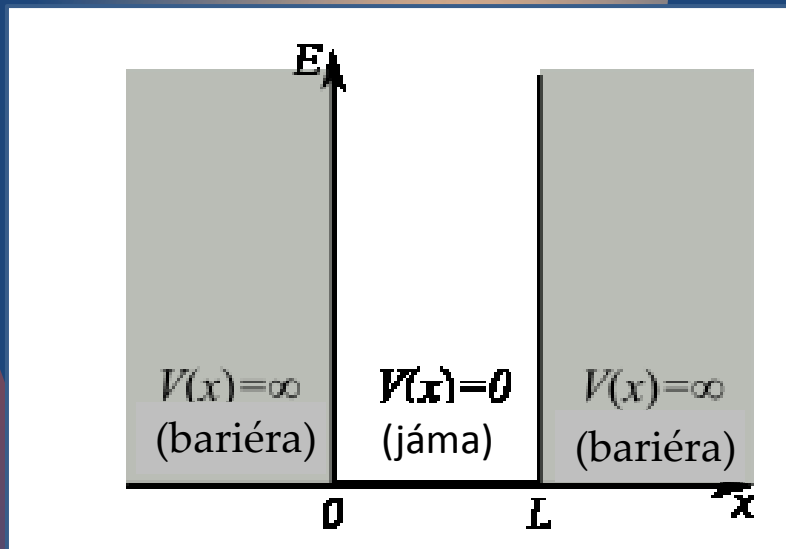
$$mv = p = \sqrt{2m(E - V)}$$

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

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.



$$\left(\sqrt{-} \right)$$

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: $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

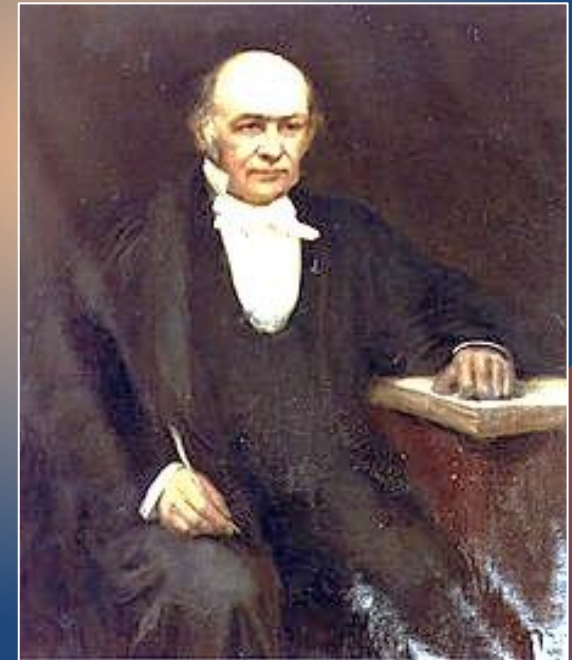
Kvantově: řeším 1 rovnici o 2 neznámých:

Operátor
funkci změni
na jinou, z ní
nějak
odvozenou



Pro částici v 1-rozměrné jámě: $\hat{H}\psi = E\psi$

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 dvojnásobným derivováním vrátí na svůj původní funkční předpis, až na konstantu.

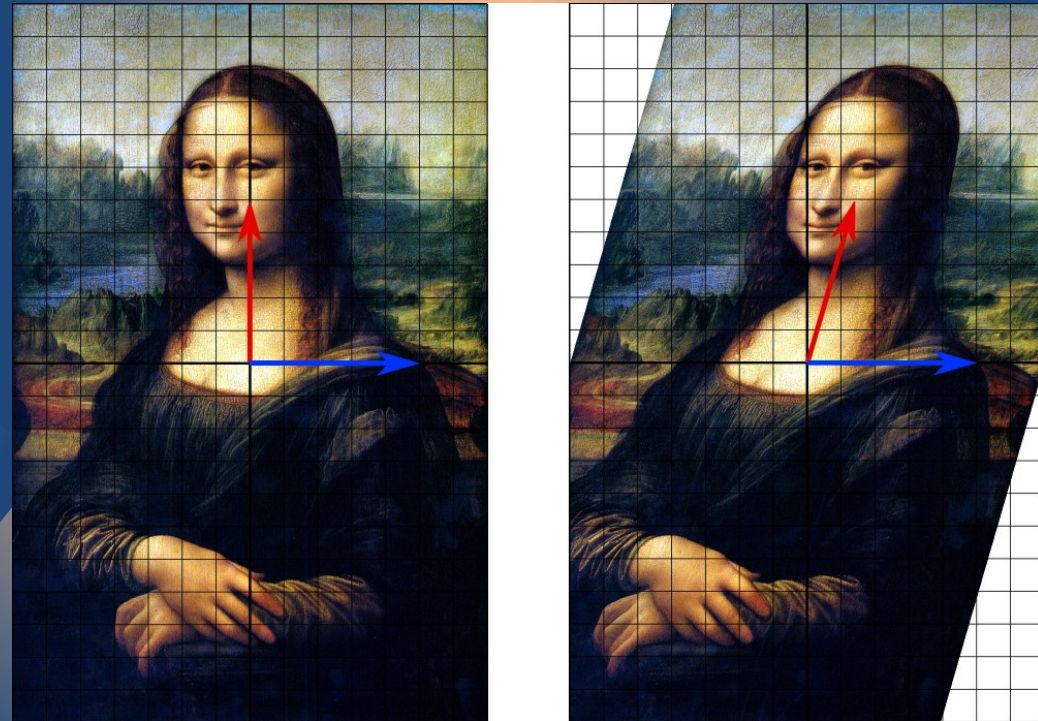
Platí to pro námi nalezené sinusoidy?

Obecný postup v QM:

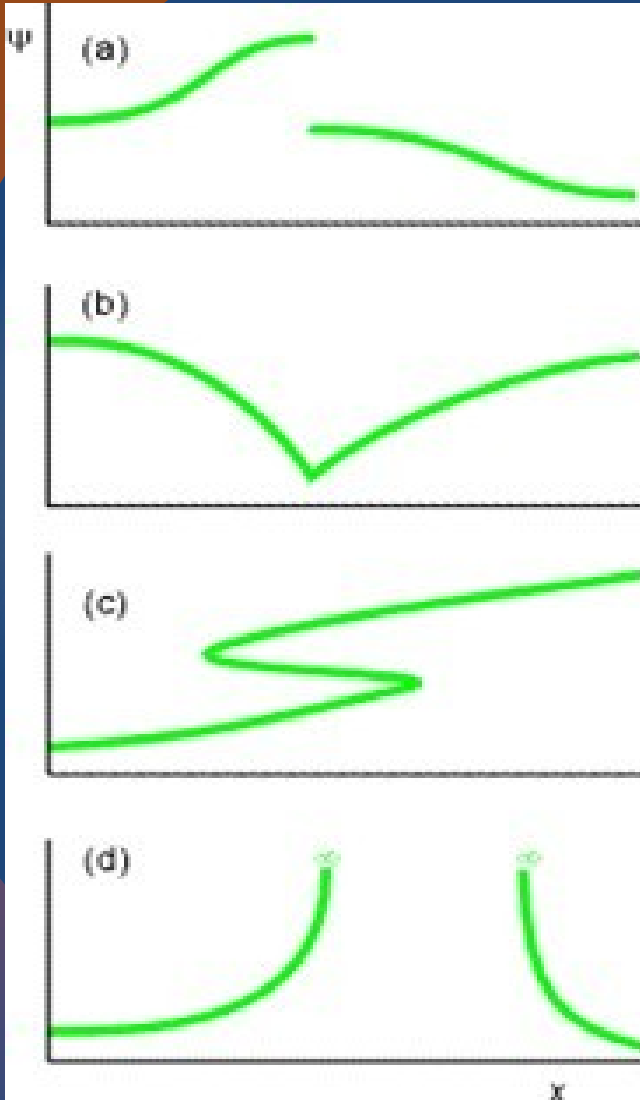
1. Napíšu klasický předpis pro výpočet veličiny
2. Z něj vytvořím předpis kvantový, tzv. operátor
3. Najdu funkce, které operátor pouze vynásobí konstantou.

VLASTNÍ
FUNKCE
OPERÁTORU

VLASTNÍ
HODNOTY
VELIČINY



1.13 Chybějící rovnice do soustavy s neznámými a a V



Spojitosť

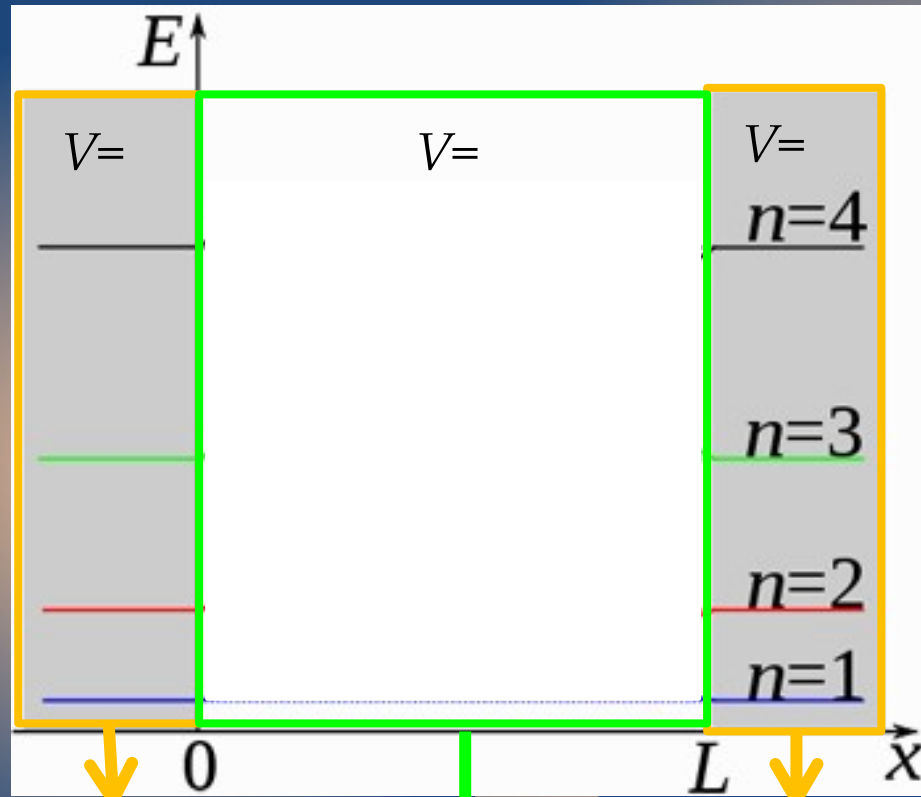
Spojitosť 1. derivace až na výjimky (singularity)

Jednoznačnost

Integrovatelnost druhé mocniny (kvadrátu)

1.14 F

Zakřivení
vlnové
funkce:
míra E_{kin}

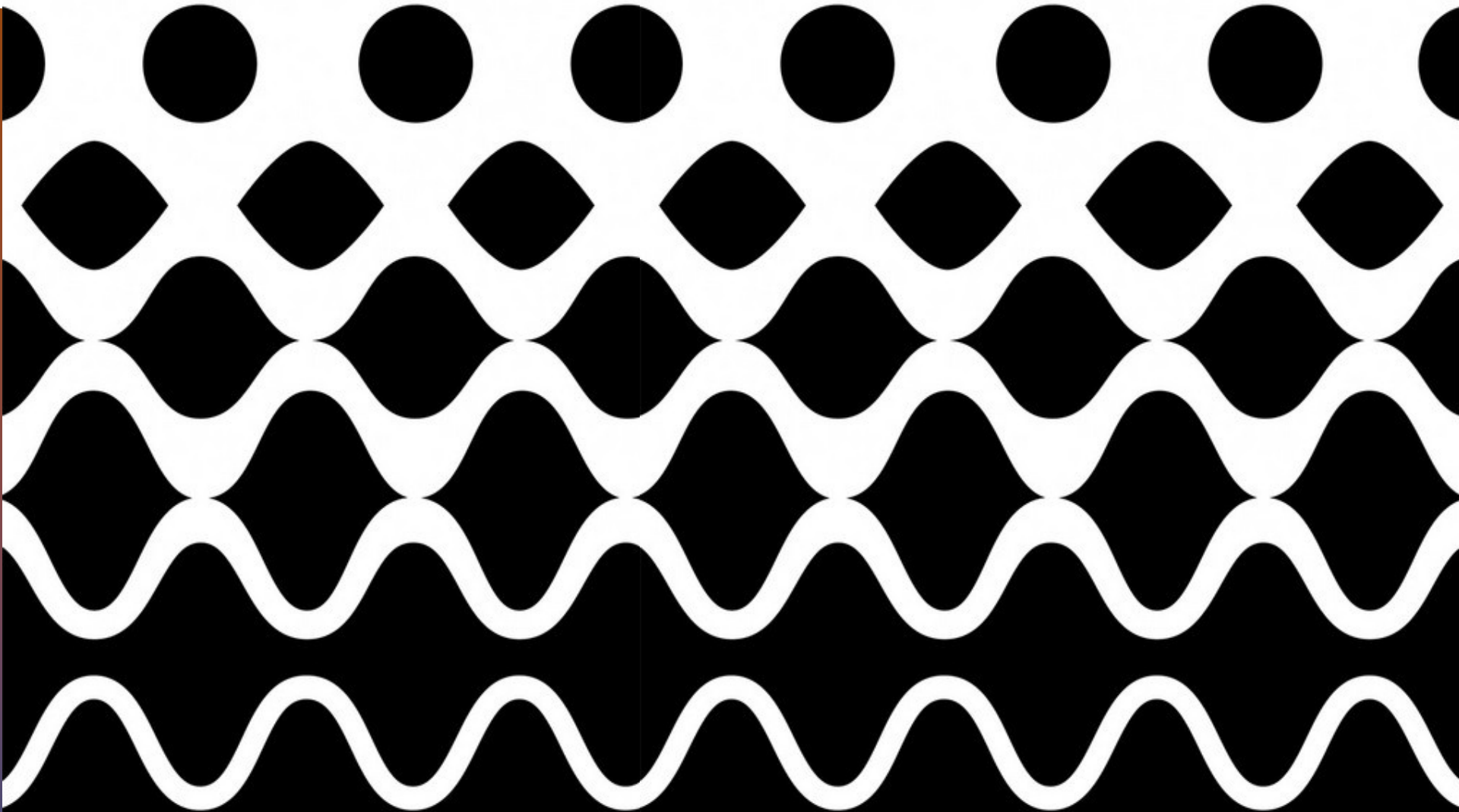


=0 (energeticky nedostupná oblast)

Neznám ale periodu.

Který požadavek na fyzikální přijatelnost mi ji pomůže určit?

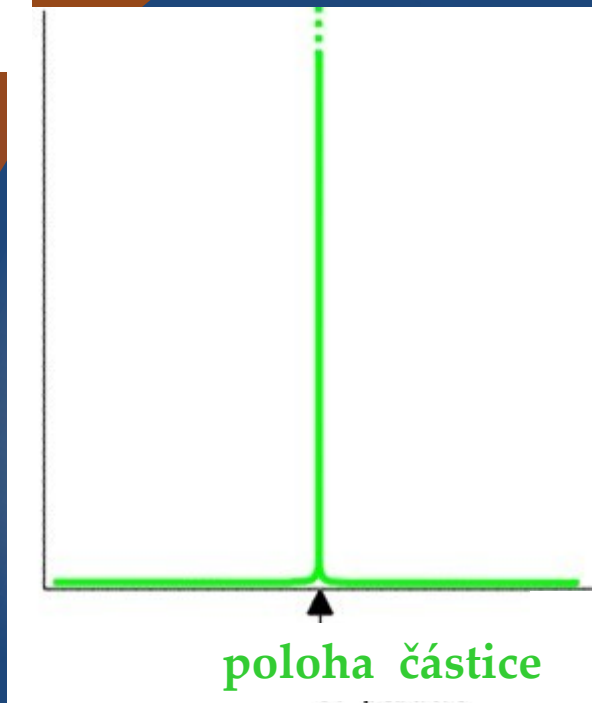
Částicový pohled lze získat i z vln!



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

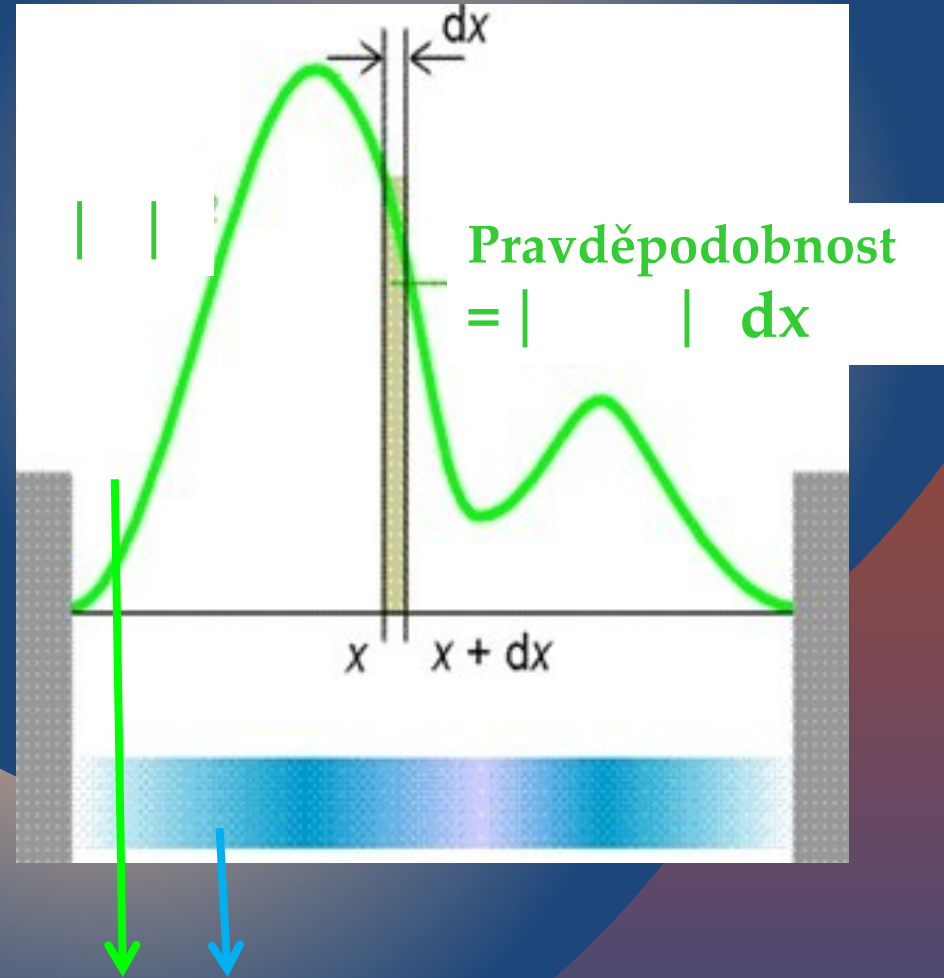
CREDIT: N.Brunner and J.E. Simmonds

1.15 V



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

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



HUSTOTA pravděpodobnosti výskytu částice

1.16 Pojem Atomového Orbitalu (AO)

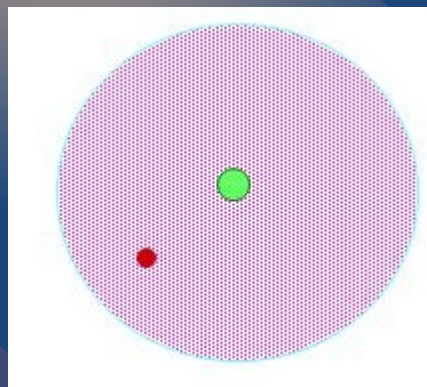
Atomový orbital = vlnová funkce pro 1 elektron

(např. proto,
že obecně nabývá komplexních hodnot)

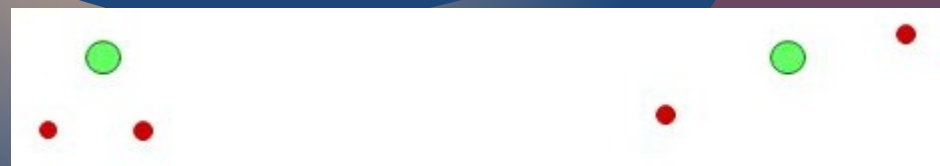
Tím tedy máme definovány AO pro systémy H , He^+ , Li^{2+} , ...

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