

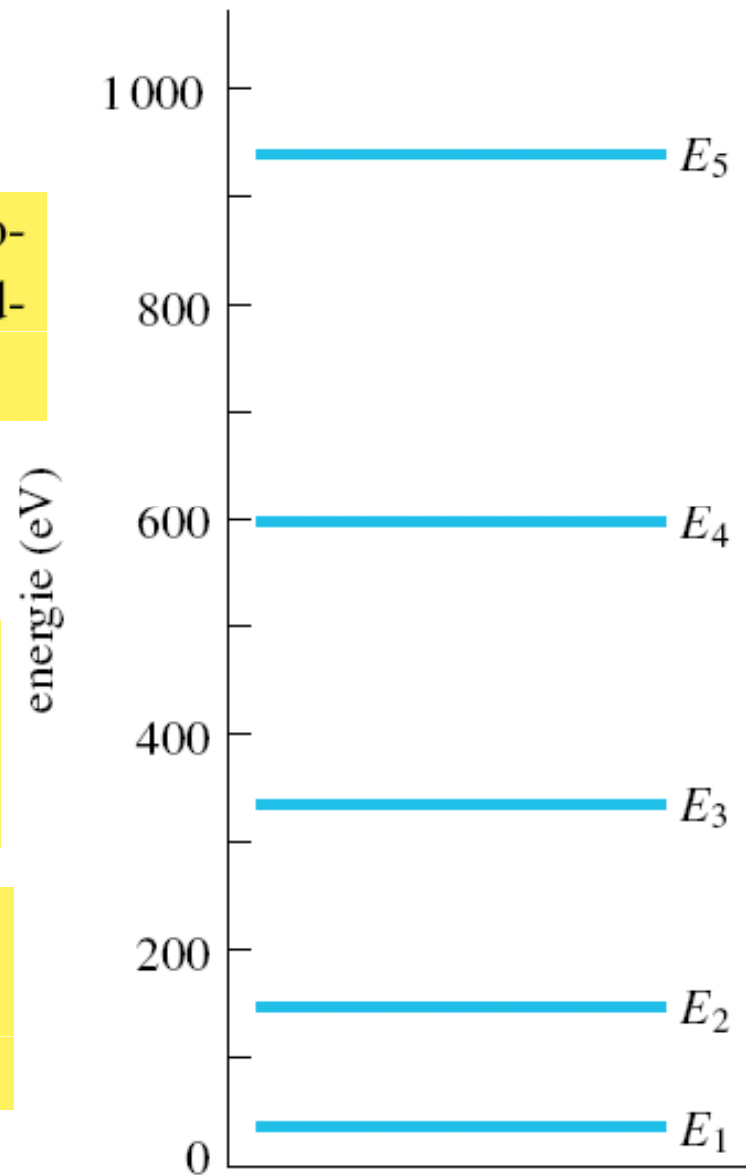
## nekonečně hluboká potenciálová jáma – změny energie

$$E_n = \left( \frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2$$

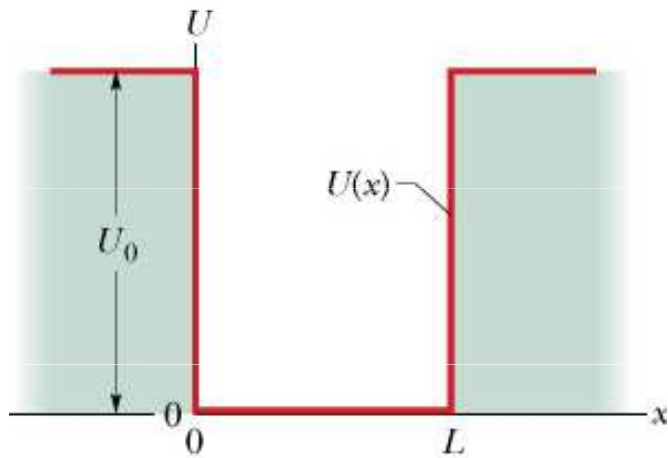
Prostorové omezení vlny vede ke kvantování, tj. k povolení jen vybraných diskrétních stavů s diskrétními hodnotami energie.

Vázaný elektron může absorbovat jen takový foton, jehož energie  $hf$  se rovná rozdílu energií elektronu v počátečním a v koncovém stavu (s vyšší energií).

Vázaný elektron může vyzářit jen takový foton, jehož energie  $hf$  se rovná rozdílu energie elektronu v počátečním a koncovém stavu (s nižší energií).

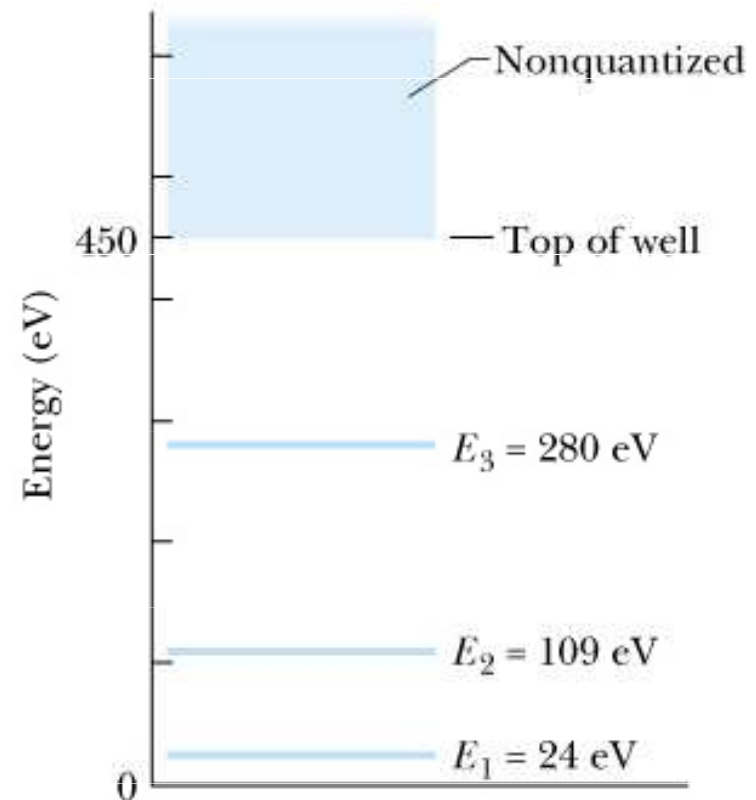
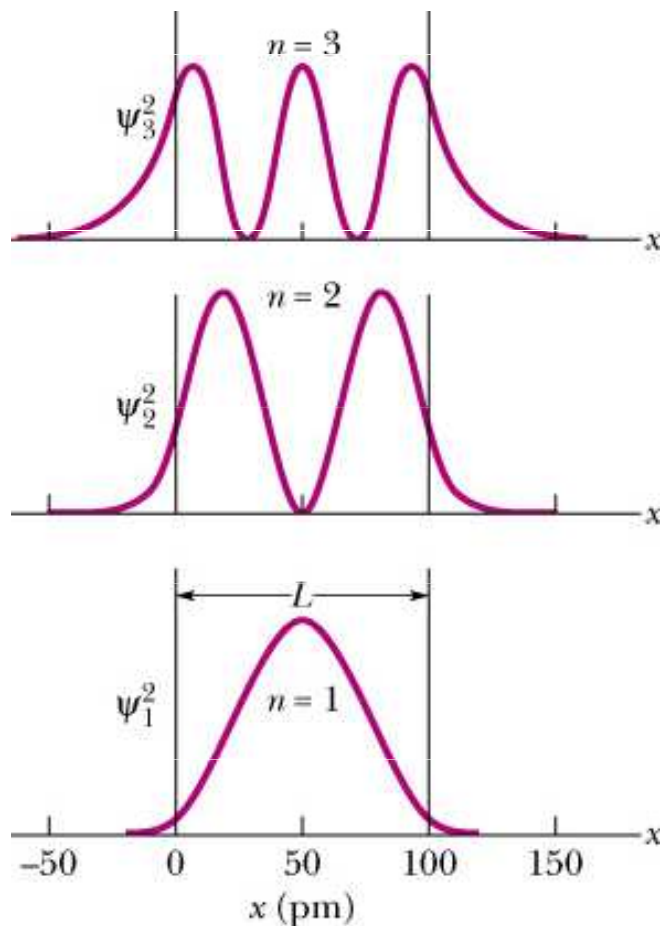


# Potenciálová jáma konečné hloubky

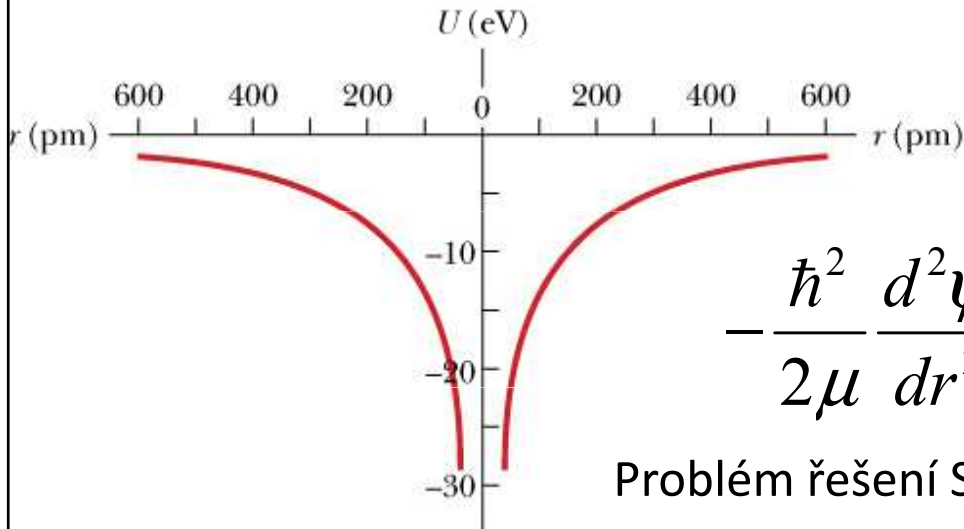


$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi = 0$$

Energetické hladiny pro případ  $U_0 = 450 \text{ eV}$



# Schrödingerova rovnice atomu vodíku



$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi$$

Problém řešení SR rovnice pro atom vodíku je sféricky symetrický  
 --- ve sférických souřadnicích  $(r, \theta, \phi)$

Vlnovou funkci pak lze vyjádřit jako součin  
 radiální a úhlové vlnové funkce

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

Výsledný tvar vlnové funkce závisí na třech kvantových číslech

$n$  – hlavní kvantové číslo, souvisí s energií stavu

$l$  – orbitální kvantové číslo, souvisí s velikostí momentu hybnosti

$m$  – magnetické kvantové číslo, souvisí se směrem momentu hybnosti

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

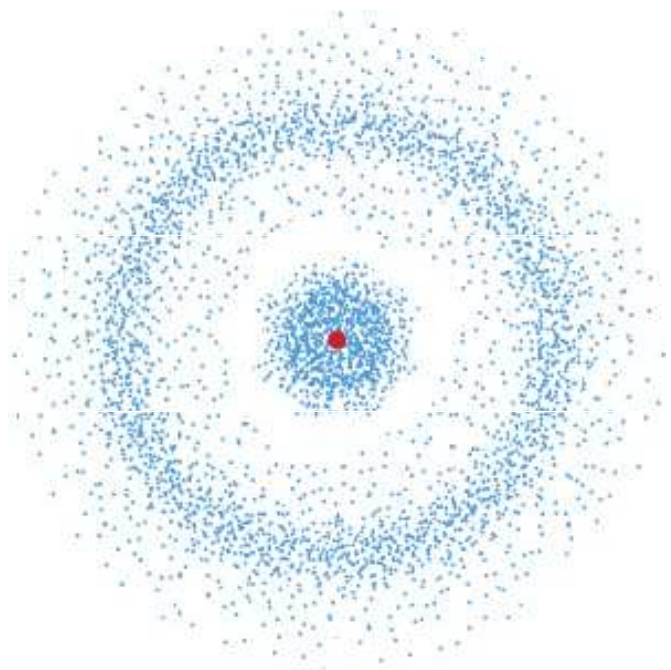
$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

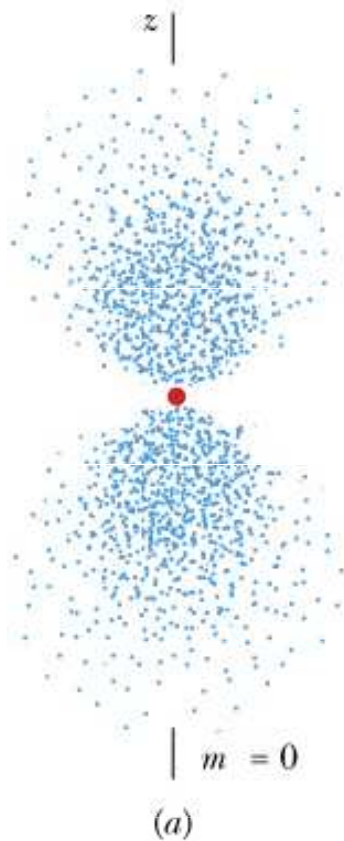
$$m = -l, -(l-1), \dots, (l-1), l$$

# Vyšší energetické stavy

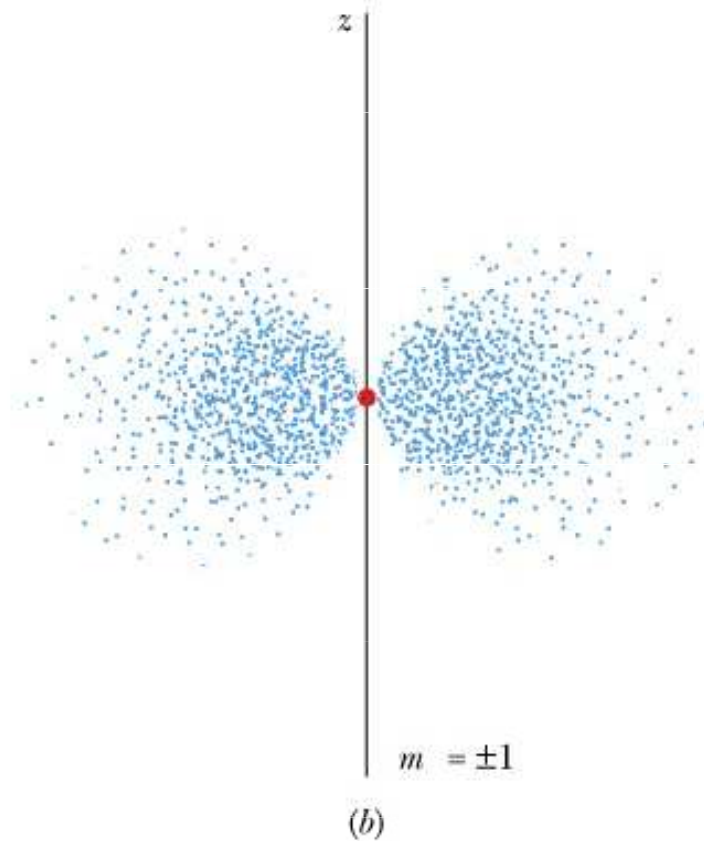
$$n = 2, l = 0, m = 0$$



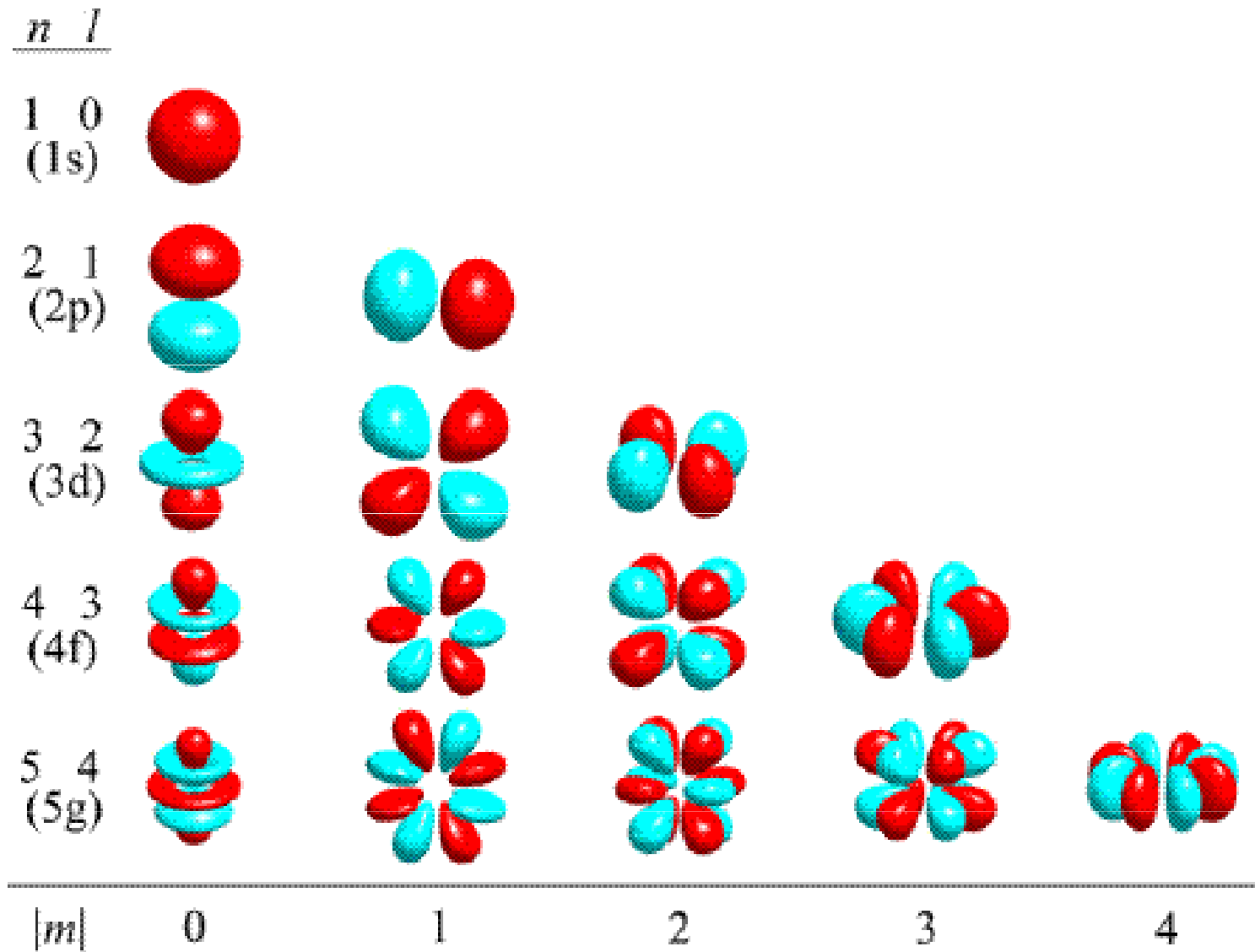
$$n = 2, l = 1, m = 0$$



$$n = 2, l = 1, m = \pm 1$$



# Atomové orbitály



# Stern-Gerlachův experiment

Otto Stern, Walther Gerlach, 1922

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad \text{Potenciální energie dipólu } \mu \text{ v magnetickém poli } B$$

$$U = -\mu_z B \quad \text{Magnetické pole } B \text{ orientováno ve směru osy } z$$

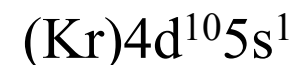
$$F_z = -\frac{dU}{dz} = \mu_z \frac{dB}{dz} \quad \text{Síla ve směru osy } z$$

Klasická fyzika předpovídá rozmazání stopy na stínítku ve směru osy  $z$ , protože orientace magnetických momentů atomů stříbra je náhodná

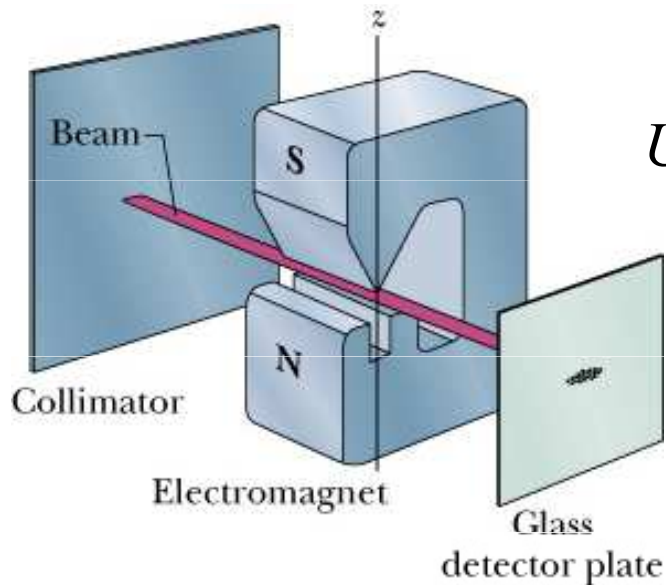
Experiment ale dává „neklasický“ výsledek: na stínítku jsou dvě stopy symetricky vůči původnímu místu dopadu

**Průmět momentu do osy  $z$ ,  $\mu_z$ , je kvantován**

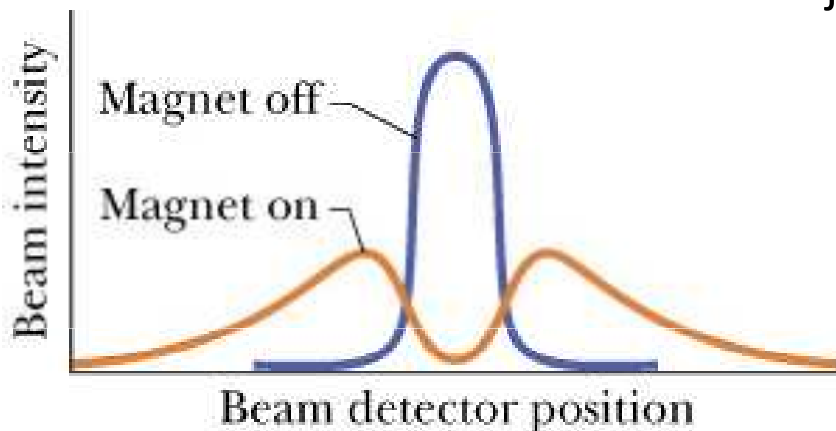
atomy Ag:



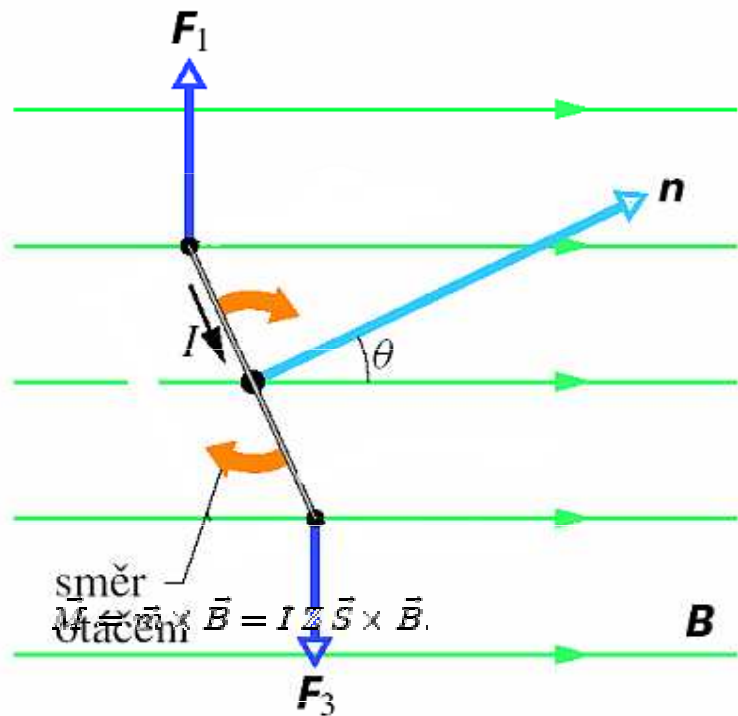
$$l = 0$$



Svazek atomů stříbra ve vakuové trubici prochází mezi póly silného magnetu, experiment sleduje polohu dopadu atomů stříbra na stínítku

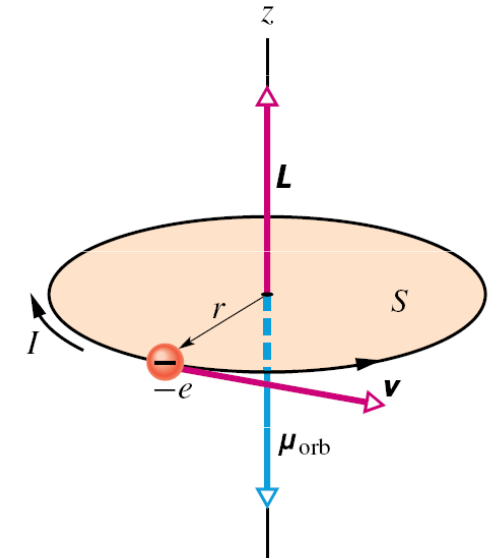


# Souvislost orbitálního momentu hybnosti a magnetického momentu



Na smyčku protékanou proudem  $I$  působí mag.pole otáčivým momentem  $M$ :

$$\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$



Magnetický dipólový moment  $\mu$  je vektorová veličina charakterizující smyčku jako „zdroj magnetického pole“.

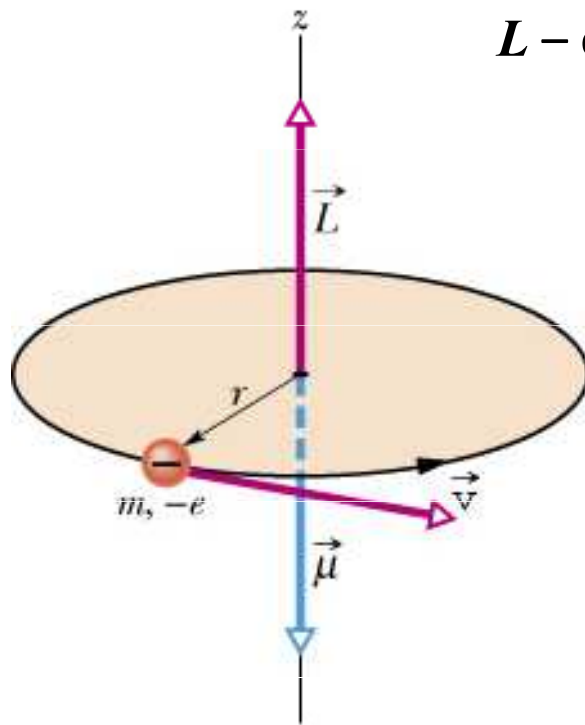
$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

**Moment hybnosti** je vektorová fyzikální veličina, která popisuje mechanicky otáčivý pohyb částice.

Pojem momentu hybnosti je analogický pojmu hybnosti: tak jako je hybnost součinem hmotnosti a rychlosti v případě translačního pohybu, tak je moment hybnosti součinem momentu setrvačnosti a úhlové rychlosti v případě rotačního pohybu.částice



# Elektron na klasické orbitě



$L$  – orbitální moment hybnosti (částice vykonává kruhový pohyb)

$\mu$  – orbitální magnetický moment

Kruhový pohyb elektronu vytváří proudovou smyčku, kterou teče proud  $i$

$$\mu = iA = i2\pi r^2$$

$$i = \frac{e}{T} = \frac{e}{2\pi r/v}$$

$$\mu = \frac{e}{2\pi r/v} \pi r^2 = \frac{evr}{2}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

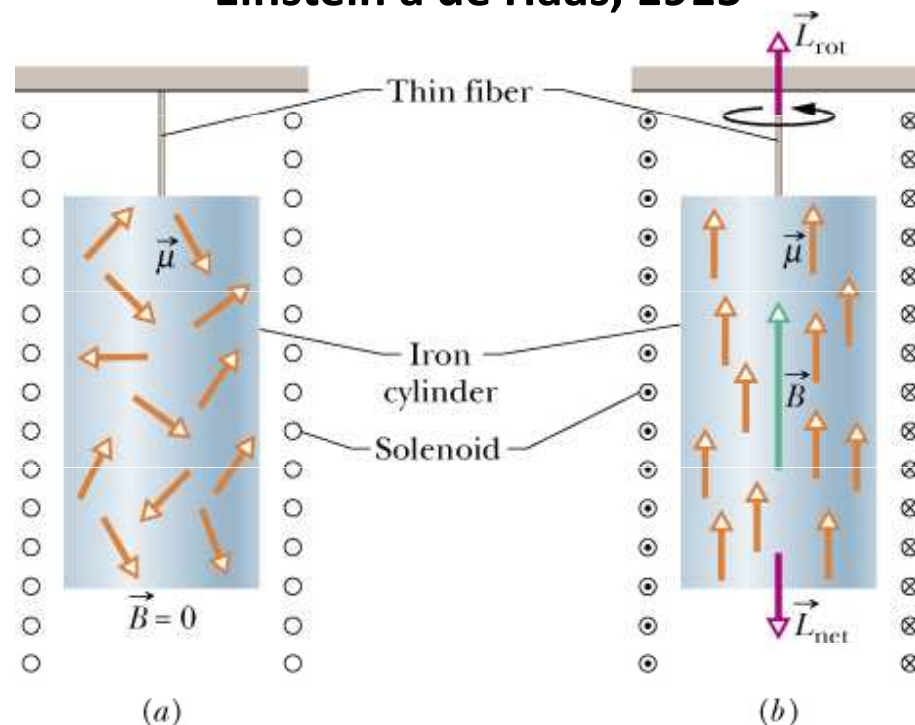
$$\vec{L} = m(\vec{r} \times \vec{v}) \Rightarrow L = mrv \sin 90^\circ = mrv$$

**Orbitální magnetický moment elektronu má opačný směr než orbitální moment hybnosti**



# Experimentální důkaz

Einstein a de Haas, 1915



Železný válec v klidu bez magnetického pole, magnetické momenty atomů orientovány náhodně

Proud v solenoidu vytváří makroskopické magnetické pole  $\vec{B}$ , magnetické momenty atomů se orientují podle magnetického pole

Při orientaci magnetických momentů dochází i k orientaci orbitálních momentů hybnosti, což vytváří makroskopický moment hybnosti. Jelikož byl válec původně v klidu (nulový moment hybnosti) z důvodu zákona zachování momentu hybnosti se musí válec začít otáčet aby celkový moment hybnosti po zapnutí pole zůstal nulový

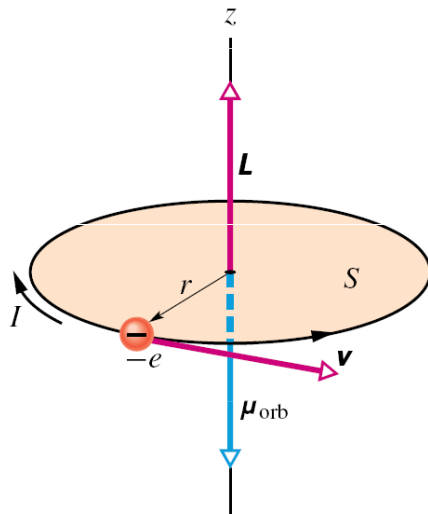
# Orbitální moment elektronu kvantově

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

Výsledný vztah je identický, nezáleží na tom zda používáme klasickou nebo kvantovou fyziku, ale Kvantová fyzika říká, že  **$m$  a  $L$  nelze měřit**, měřitelné jsou pouze průměty těchto vektorů do zvolené osy  $z$

Složka  $L_z$  orbitálního momentu je kvantována

Velikost orbitálního momentu je rovněž kvantována



$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \Rightarrow \mu = \frac{e}{2m} \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

$l$  – vedlejší (orbitální) kvantové číslo,  $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$

$$L_z = m_l \hbar$$

$$\mu_z = -\frac{e}{2m} L_z = -m_l \mu_B$$

Bohrův magneton  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{orb}} = -\frac{e}{2m} \mathbf{L}$$

orbitální magnetický  
dipólový moment

orbitální moment  
hybnosti

- lze měřit jen složka ve zvoleném směru (např. z)
- je kvantován

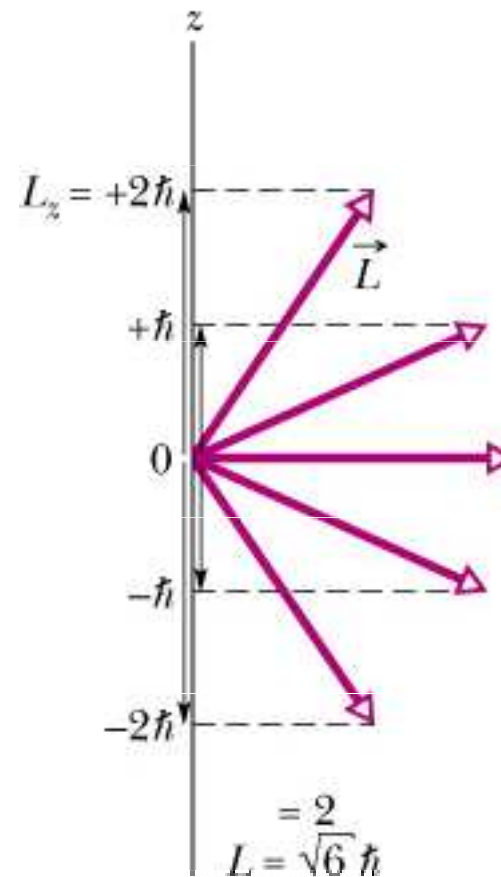
$$L_z = m_l \hbar$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l,$$

$$\mu_{\text{orb},z} = -m_l \frac{e\hbar}{2m} = -m_l \mu_B$$

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

Bohrův magneton



Průměty  $L_z$  pro elektron s  
vedleším kvantovým číslem  $l = 2$

$$E_p = -\boldsymbol{\mu}_{\text{orb}} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}} = -\mu_{\text{orb},z} B_{\text{ext}}$$

# Spin

## Spin je vlastností každé částice

Elektron má kromě orbitálních momentů ještě vlastní moment hybnosti – spin ( $\mathcal{S}$ ) a s ním spojený spinový magnetický moment ( $\mu_s$ )

orbitální

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m} \vec{S}$$

spinový

Velikost spinu  $S$      $s$  – spinové kvantové číslo – jen jedna hodnota, pro  $e$  je  $1/2$

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad \Rightarrow \quad \mu_s = \frac{e}{m} \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

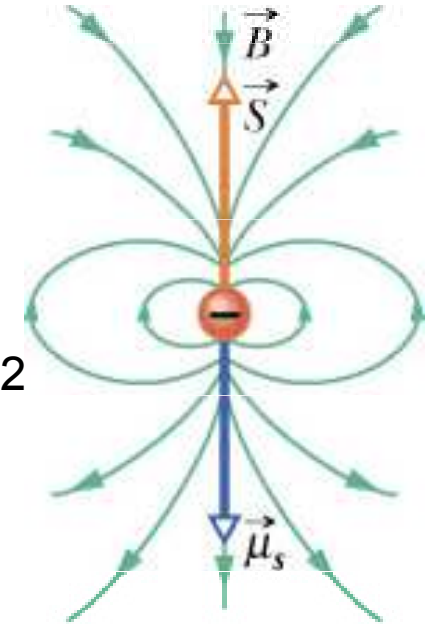
podobně pro spinový magnetický moment:

Spin  $\mathcal{S}$  není měřitelná veličina, lze měřit pouze složku do zvoleného směru, tato složka je také kvantována

$$S_z = m_s \hbar \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$\mu_{s,z} = -\frac{e}{m} S_z = \pm \frac{e\hbar}{2m}$$

$$\mu_{s,z} = -2m_s \mu_B$$



Částice s poločíselným spinem ( $e$ ,  $p$ , neutron,  $s = 1/2$ ), **fermiony**

Částice s celočíselným spinem (foton, alfa  $s = 1$ ), **bosony**

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{e}{m}\mathbf{S},$$

- lze měřit jen složka ve zvoleném směru (např. z)
- je kvantován

spinový magnetický  
dipólový moment

spin (spinový moment  
hybnosti)

$$\mu_{orb,z} = -m_l \mu_B, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J / T}$$

*Bohrův magneton*

$$\mu_{s,z} = -2m_s \mu_B$$

$$S_z = m_s \hbar \quad \text{pro } m_s = \pm \frac{1}{2}$$

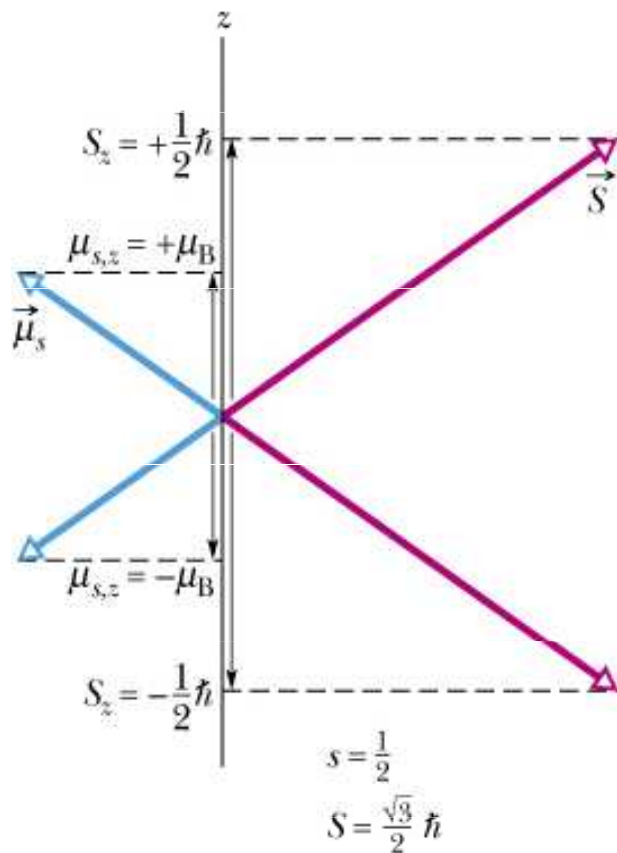
jen dvě hodnoty

$$\mu_{s,z} = -\frac{e}{m} S_z = \pm \frac{e\hbar}{2m} = \pm \mu_B$$

$$E_p = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{ext} = -\mu_{s,z} B,$$

# Spinový a orbitální moment

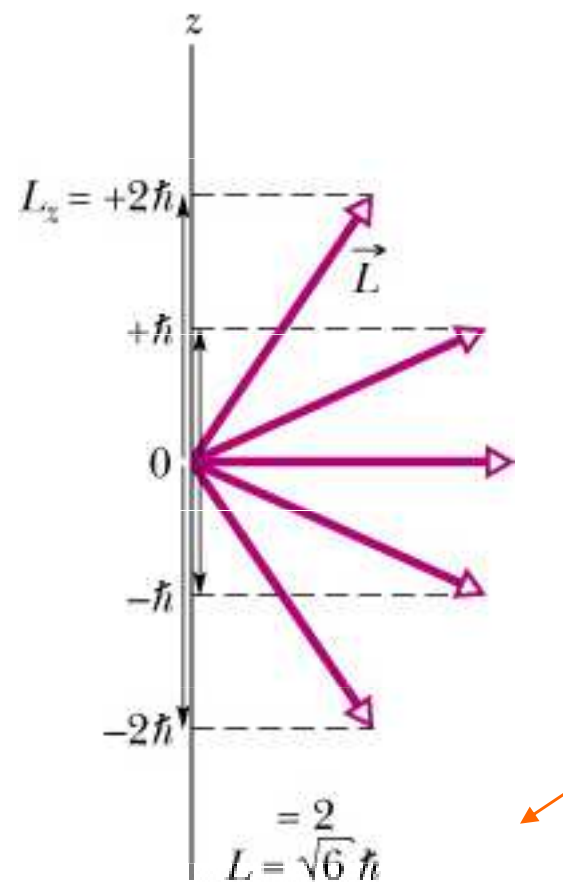
$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m} \vec{S}$$



$$S_z = m_s \hbar \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$\mu_{s,z} = -2m_s \mu_B$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$



$$L_z = m_l \hbar \quad m_l = -l, \dots, l$$

$$\mu_z = -m_l \mu_B$$

## Energie elektronu v atomovém obalu

Základním vztahem pro energii je energie elektronu v poli jádra:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

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:

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





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  $I_i \leftrightarrow I_j$

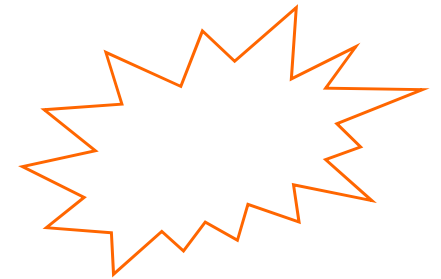
- interakce orbitálních a spinových magnetických momentů  $I_i \leftrightarrow S_j$

- výměnné interakce

- interakce  $I_i \leftrightarrow S_i$

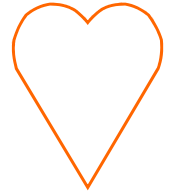
- interakce  $S_i \leftrightarrow S_j$

- interakce orbitálních a spinových magnetických momentů elektronů s magnetickým momentem jádra



# Kvantově-mechanický popis atomového obalu

## Vlastnosti elektronu v atomovém obalu



stav elektronu je jednoznačně určen 4 kvantovými čísly:

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

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$l$  – 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:

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

**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:**

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

**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**

# Kvantová čísla a veličiny

[http://cs.wikipedia.org/wiki/Elektronov%C3%A1\\_konfigurace](http://cs.wikipedia.org/wiki/Elektronov%C3%A1_konfigurace)

## Elektron v atomu

| kvantové číslo       | symbol | možné hodnoty                       | veličina, význam                                       |
|----------------------|--------|-------------------------------------|--|
| hlavní               | $n$    | 1, 2, 3,...                         | Vzdálenost od jádra, $r$                               |
| vedlejší (orbitální) | $l$    | 0, 1, 2, ... , $(n-1)$              | Velikost orbitálního momentu hybnosti, $L$             |
| magnetické orbitální | $m_l$  | 0, $\pm 1$ , $\pm 2$ , ..., $\pm l$ | Průmět orbitálního momentu hybnosti do osy $z$ , $L_z$ |
| spinové              | $s$    | 1/2                                 | Velikost spinového momentu hybnosti, $S$               |
| magnetické spinové   | $m_s$  | $\pm 1/2$                           | Průmět spinového momentu hybnosti do osy $z$ , $S_z$   |

### Pauliho vylučovací princip (Wolfgang Pauli, 1925)

Dva elektrony vázané v atomu nemohou mít stejná kvantová čísla

**Žádné dva fermiony nemohou být ve stejném kvantovém stavu**

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:

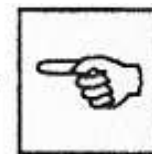
$$\sum_{l=0}^{n-1} 2 \cdot (2l + 1) = 2 \cdot \frac{n}{2} \{ [2(n-1) + 1] + 1 \} = 2n^2$$

počet možných  $m_s$ 
počet možných  $m$

počet možných  $l$



## Pravidla výstavby atomového obalu



### **Princip minima energie:**

Libovolný systém (v daném případě atom) nepodléhající vnějšímu působení přechází samovolnými procesy do stavu s nejnižší možnou energií.

### **Pauliho vylučovací princip:**

Dva fermiony (v případě atomu dva elektrony) se nemohou nacházet ve stejném stavu, jejich stavy se musí lišit alespoň v jednom kvantovém čísle.

### **Hundovo pravidlo maximální multiplicity:**

Součet magnetických spinových čísel  $m_s$  všech elektronů v podslupce, resp. tzv. multiplicita  $2 \sum_{\text{podslupka}} m_s + 1$ , musí být maximální.

### **Madelungovo pravidlo $n + l$ :**

Ze dvou elektronů má větší energii elektron v podslupce s větším součtem  $n + l$ , pokud je tento součet stejný, má větší energii elektron v podslupce s vyšší hodnotou čísla  $n$ .

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 | $2 + 14 + 10 + 6 = 32$ |

Atomic number  
Symbol  
Atomic weight

Metal  
Semimetal  
Nonmetal

|       |   |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |     |     |     |     |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-------|---|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|----|----|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 1     | 2   |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       | 13    | 14    | 15  | 16  | 17  | 18  |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 1     | H   | 2     | He    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       | 5   | 6   | 7   | 8   | 9   | 10 |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 2     | Li  | Be    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       | B     | C   | N   | O   | F   | Ne  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 3     | Na  | Mg    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       | Al    | Si  | P   | S   | Cl  | Ar  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 4     | K   | Ca    | Sc    | Ti    | V     | Cr    | Mn    | Fe    | Co    | Ni    | Cu    | Zn    | Ga    | Ge  | As  | Se  | Br  | Kr  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 5     | Rb  | Sr    | Y     | Zr    | Nb    | Mo    | Tc    | Ru    | Rh    | Pd    | Ag    | Cd    | In    | Sn  | Sb  | Te  | I   | Xe  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 6     | Cs  | Ba    | Lu    | Hf    | Ta    | W     | Re    | Os    | Ir    | Pt    | Au    | Hg    | Tl    | Pb  | Bi  | Po  | At  | Rn  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 7     | Fr  | Ra    | Lr    | Rf    | Db    | Sg    | Bh    | Hs    | Mt    | Uun   | Uuu   | Uub   | Uut   | Uuq | Uup | Uuh | Uus | Uuo |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 6     | <table border="1"> <tr> <td>57</td> <td>58</td> <td>59</td> <td>60</td> <td>61</td> <td>62</td> <td>63</td> <td>64</td> <td>65</td> <td>66</td> <td>67</td> <td>68</td> <td>69</td> <td>70</td> </tr> <tr> <td>La</td> <td>Ce</td> <td>Pr</td> <td>Nd</td> <td>Pm</td> <td>Sm</td> <td>Eu</td> <td>Gd</td> <td>Tb</td> <td>Dy</td> <td>Ho</td> <td>Er</td> <td>Tm</td> <td>Yb</td> </tr> <tr> <td>138.9</td> <td>140.1</td> <td>140.9</td> <td>144.2</td> <td>146.9</td> <td>150.4</td> <td>152.0</td> <td>157.3</td> <td>158.9</td> <td>162.5</td> <td>164.9</td> <td>167.3</td> <td>168.9</td> <td>173.0</td> </tr> <tr> <td>89</td> <td>90</td> <td>91</td> <td>92</td> <td>93</td> <td>94</td> <td>95</td> <td>96</td> <td>97</td> <td>98</td> <td>99</td> <td>100</td> <td>101</td> <td>102</td> </tr> <tr> <td>Ac</td> <td>Th</td> <td>Pa</td> <td>U</td> <td>Np</td> <td>Pu</td> <td>Am</td> <td>Cm</td> <td>Bk</td> <td>Cf</td> <td>Es</td> <td>Fm</td> <td>Md</td> <td>No</td> </tr> <tr> <td>227.0</td> <td>232.0</td> <td>231.0</td> <td>238.0</td> <td>237.0</td> <td>244.1</td> <td>243.1</td> <td>247.1</td> <td>247.1</td> <td>251.1</td> <td>252.0</td> <td>257.1</td> <td>258.1</td> <td>259.1</td> </tr> </table> |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |     |     |     |     |     | 57 | 58 | 59 | 60 | 61 | 62 | 63 | 64 | 65 | 66 | 67 | 68 | 69 | 70 | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | 138.9 | 140.1 | 140.9 | 144.2 | 146.9 | 150.4 | 152.0 | 157.3 | 158.9 | 162.5 | 164.9 | 167.3 | 168.9 | 173.0 | 89 | 90 | 91 | 92 | 93 | 94 | 95 | 96 | 97 | 98 | 99 | 100 | 101 | 102 | Ac | Th | Pa | U | Np | Pu | Am | Cm | Bk | Cf | Es | Fm | Md | No | 227.0 | 232.0 | 231.0 | 238.0 | 237.0 | 244.1 | 243.1 | 247.1 | 247.1 | 251.1 | 252.0 | 257.1 | 258.1 | 259.1 |
| 57    | 58  | 59    | 60    | 61    | 62    | 63    | 64    | 65    | 66    | 67    | 68    | 69    | 70    |     |     |     |     |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| La    | Ce  | Pr    | Nd    | Pm    | Sm    | Eu    | Gd    | Tb    | Dy    | Ho    | Er    | Tm    | Yb    |     |     |     |     |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 138.9 | 140.1   | 140.9 | 144.2 | 146.9 | 150.4 | 152.0 | 157.3 | 158.9 | 162.5 | 164.9 | 167.3 | 168.9 | 173.0 |     |     |     |     |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 89    | 90  | 91    | 92    | 93    | 94    | 95    | 96    | 97    | 98    | 99    | 100   | 101   | 102   |     |     |     |     |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| Ac    | Th  | Pa    | U     | Np    | Pu    | Am    | Cm    | Bk    | Cf    | Es    | Fm    | Md    | No    |     |     |     |     |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| 227.0 | 232.0   | 231.0 | 238.0 | 237.0 | 244.1 | 243.1 | 247.1 | 247.1 | 251.1 | 252.0 | 257.1 | 258.1 | 259.1 |     |     |     |     |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |

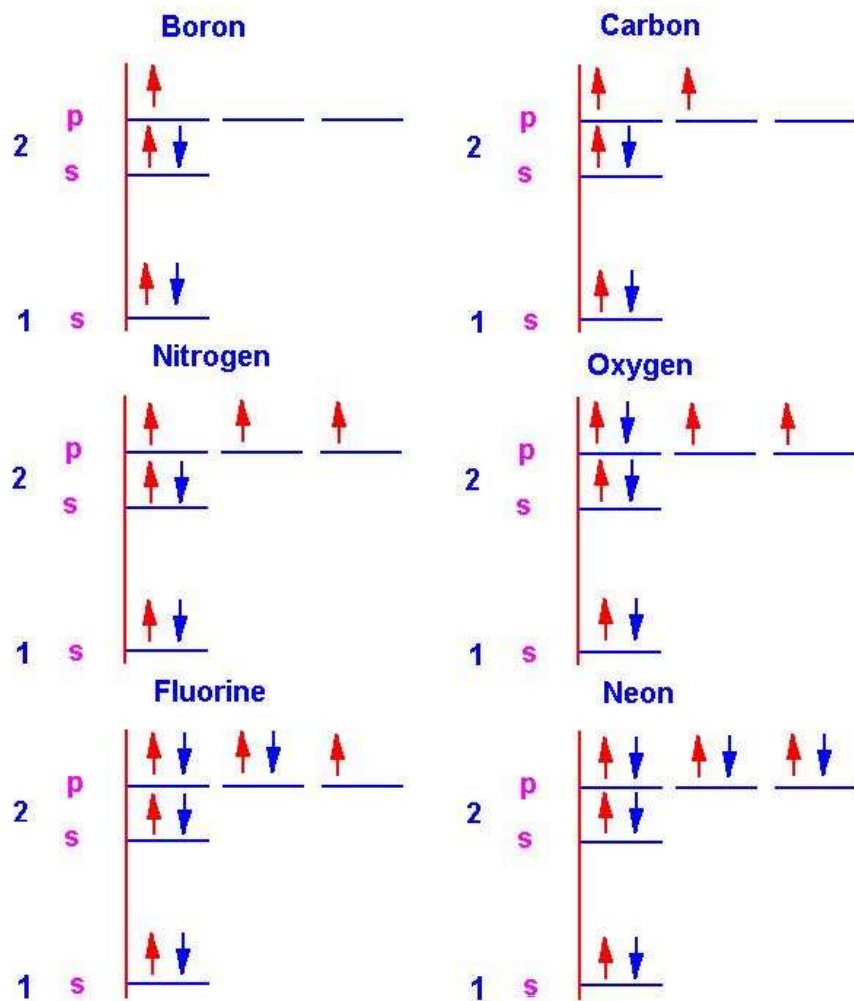
(c)1999 Kramer Paul

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

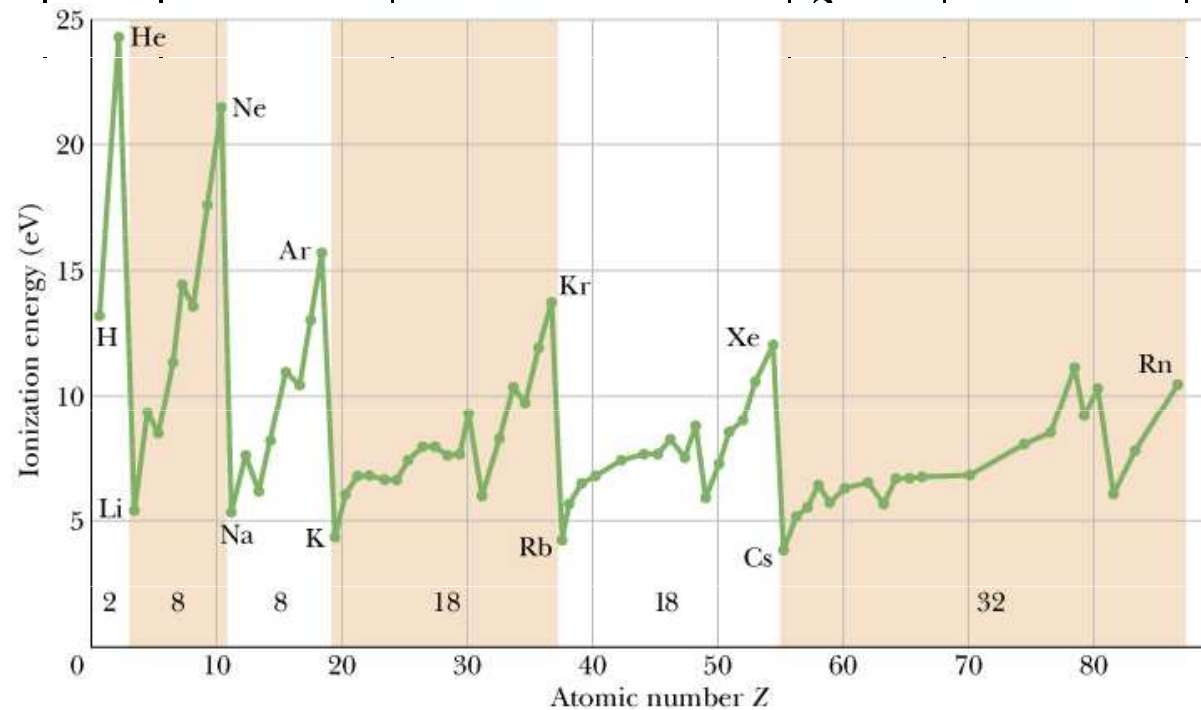


# Periodická tabulka prvků

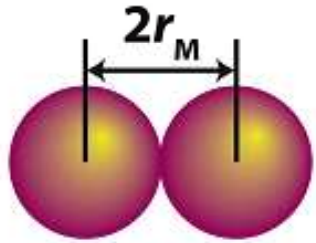
Zaplňování energetických hladin elektrony



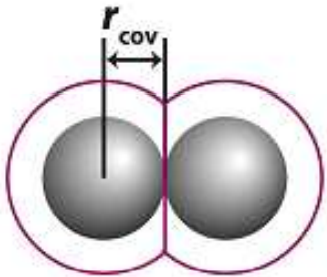
| $n$ | $l$     | $m_l$           | $m_s$                 | počet el. |
|-----|---------|-----------------|-----------------------|-----------|
| 1   | 0       | 0               | $\uparrow/\downarrow$ | 2         |
| 2   | 0, 1    | -1, 0, 1        | $\uparrow/\downarrow$ | 8         |
| 3   | 0, 1, 2 | -2, -1, 0, 1, 2 | $\uparrow/\downarrow$ | 18        |



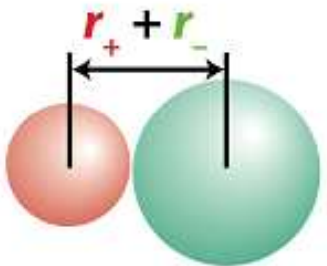
# Atomic Radius



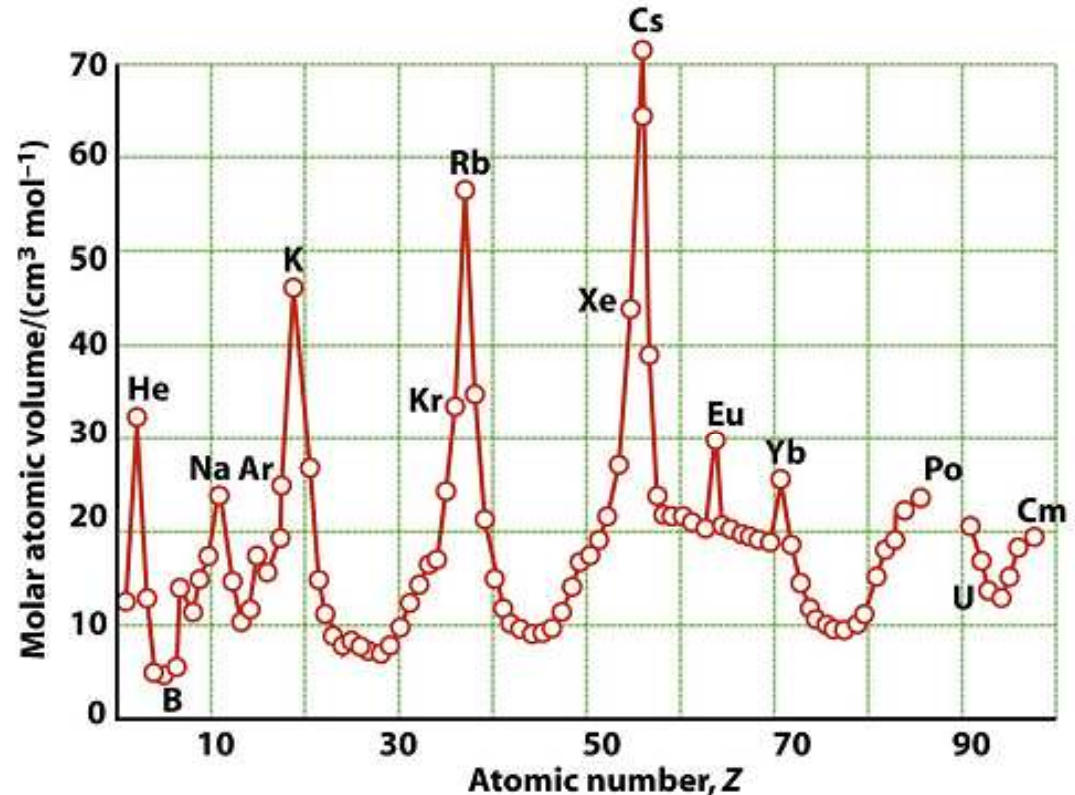
The **METALLIC RADIUS** is half of the experimentally determined distance between the nuclei of nearest neighbors in the solid



The **COVALENT RADIUS** of a non-metallic element is half of the experimentally determined distance between the nuclei of nearest neighbors in the solid

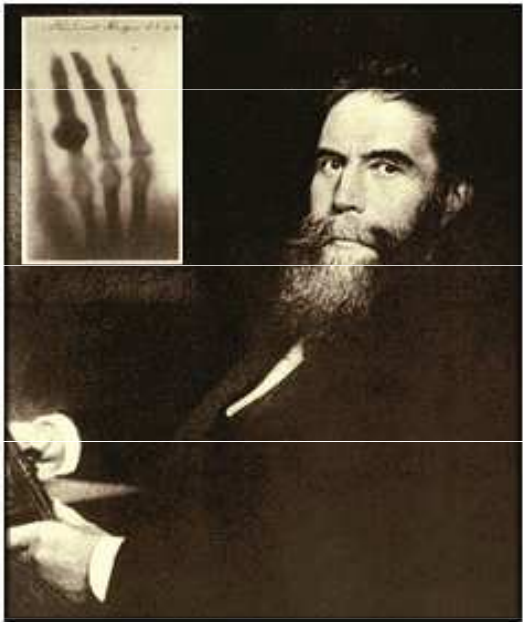


The **IONIC RADIUS** is the distance between the nuclei of cations and anions.  
 Ionic radius of  $O^{2-}$  is 140 pm.  
 What is the ionic radius of  $Mg^{2+}$ ?  
 Measure the  $Mg-O$  distance in  $MgO$ .



## Rentgenová spektra

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



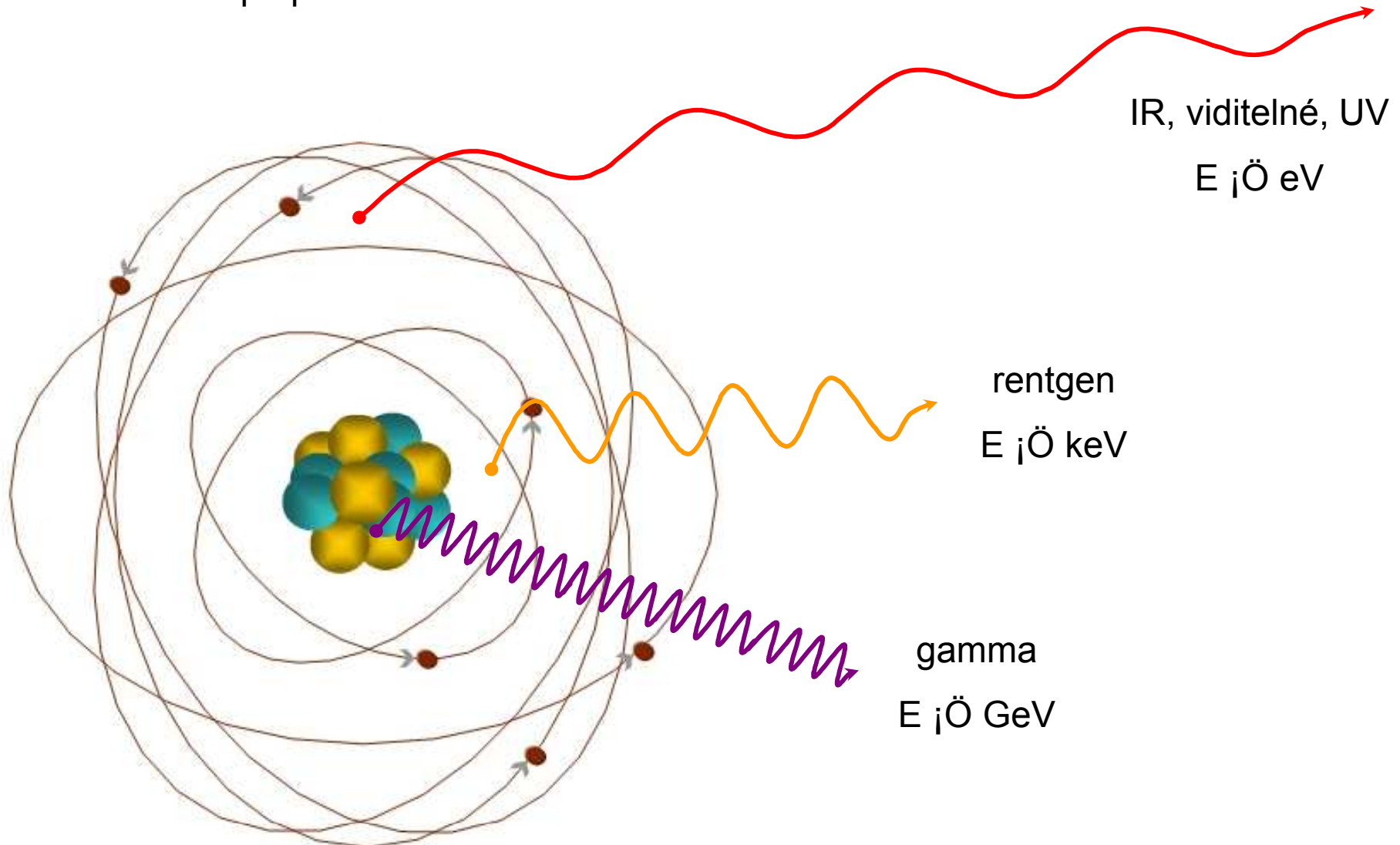
Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923)



ruka poraněná brokovnicí

# Elektromagnetické vyzařování atomu

Jaké druhy elektromagnetického záření pohlcují/vyzařují částice v atomu při přechodu mezi hladinami?







uspořádání podle Coolidge



anoda

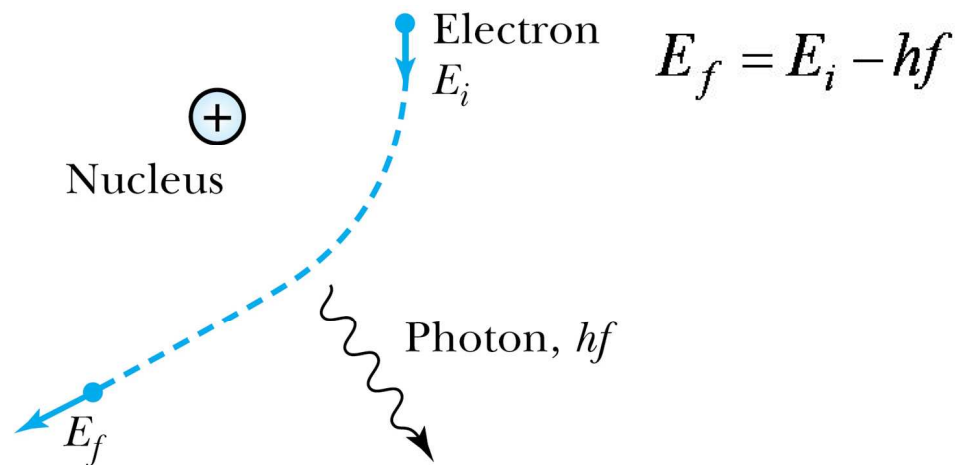
katoda



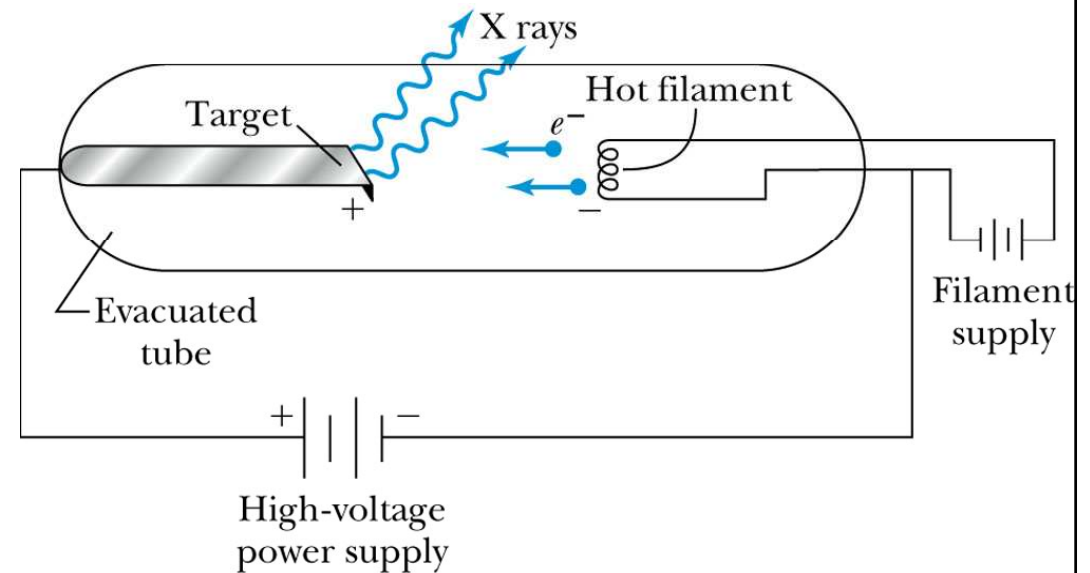
# X-Ray RTG

Elektron přicházející k povrchu vyzařuje fotony a ztrácí kinetickou energii. Tento zbržděný elektron může svou energii vyzařit jako X-ray foton.

Při dopadu elektronu na kov dochází obvykle ke ztrátě jeho kinetické energie postupně, tzn. několika srážkami s částicemi, a postupně uvolňuje svoji energii ve formě tepelného záření. Některé elektrony všechnu svoji energii ztratí při jednom nárazu. V takovém případě se všechna kinetická energie elektronu přemění ve foton. Tímto způsobem je možné získat fotony rentgenového záření.



© 2006 Brooks/Cole - Thomson



© 2006 Brooks/Cole - Thomson

X-ray neboli Rentgenovo záření je elmg záření s vln.délkou 10-0.01 nm, frekvence 30 PHz - 30 EHz.



# Inverzní fotoelektrický jev

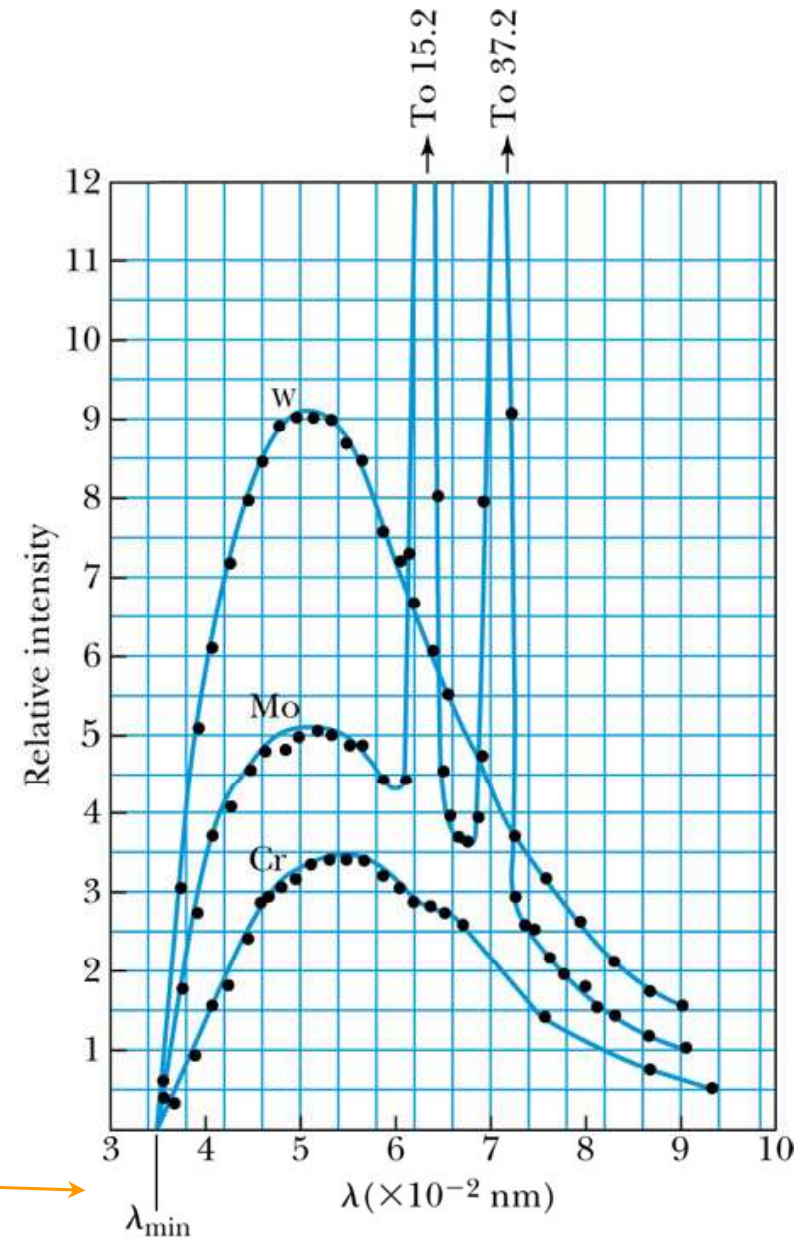
ZZE vyžaduje, aby kinetická energie elektronu byla rovná maximální energii vytvořeného fotonu. Obvykle lze zanedbat výstupní práci, která v těchto případech bývá malá oproti potentialní energii elektronu.

To vede k tzv. **Duane-Hunt limitě**, která byla objevena nejprve experimentálně.

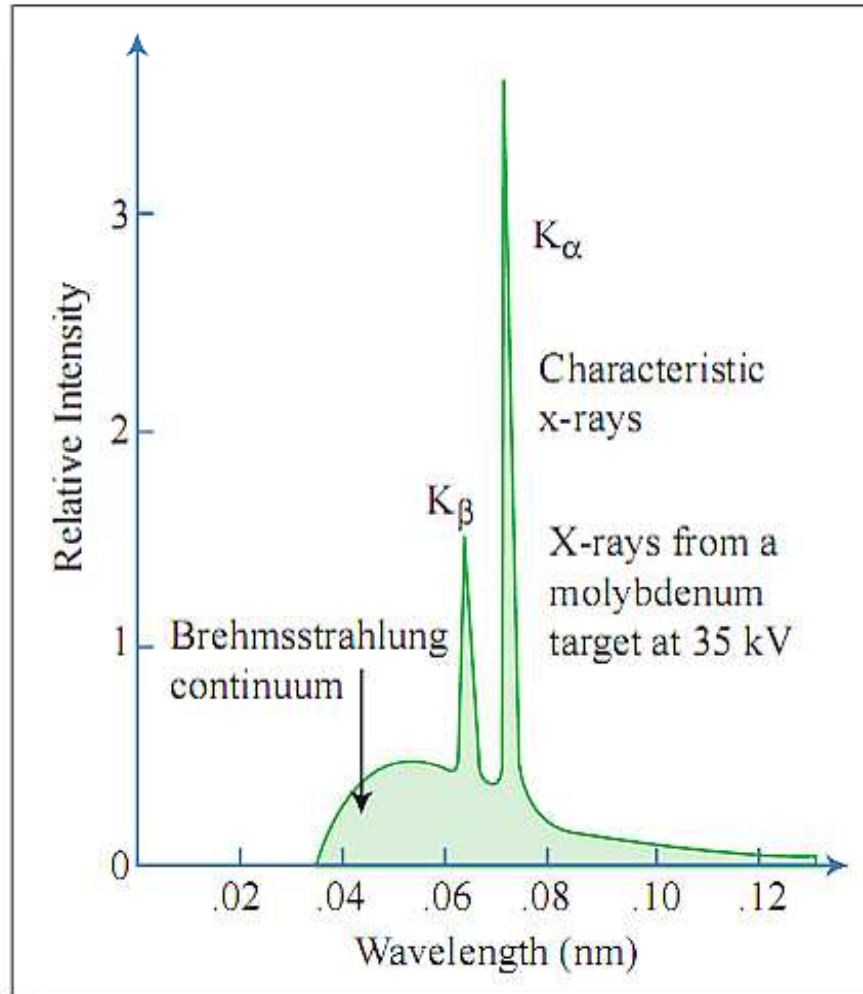
**Minimální vlnová délka** fotonu závisí pouze urychlovacím napětí a je stejná pro všechny terče.

$$eV_0 = hf_{\max} = \frac{hc}{\lambda_{\min}}$$

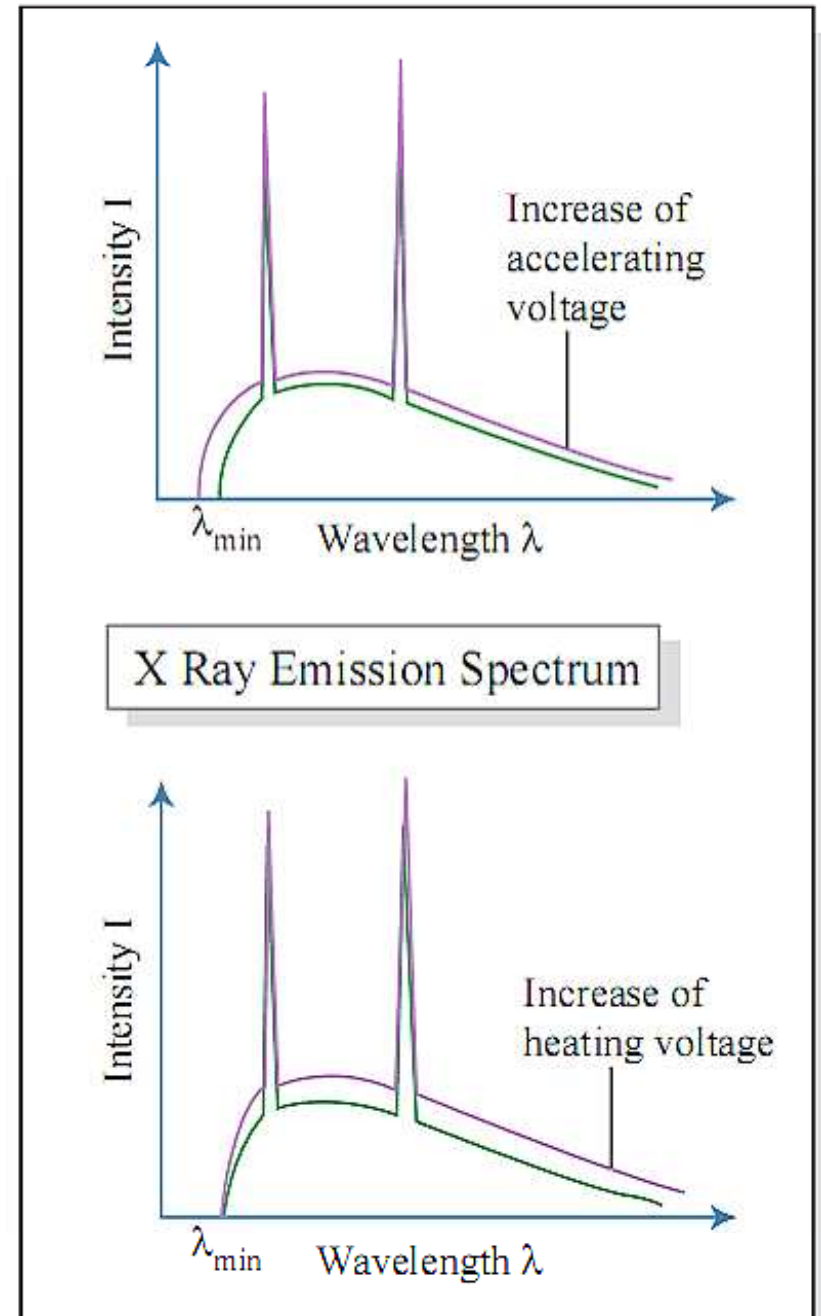
$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{eV_0} = \frac{1.240 \times 10^{-6} \text{ V} \cdot \text{m}}{V_0}$$



© 2006 Brooks/Cole - Thomson

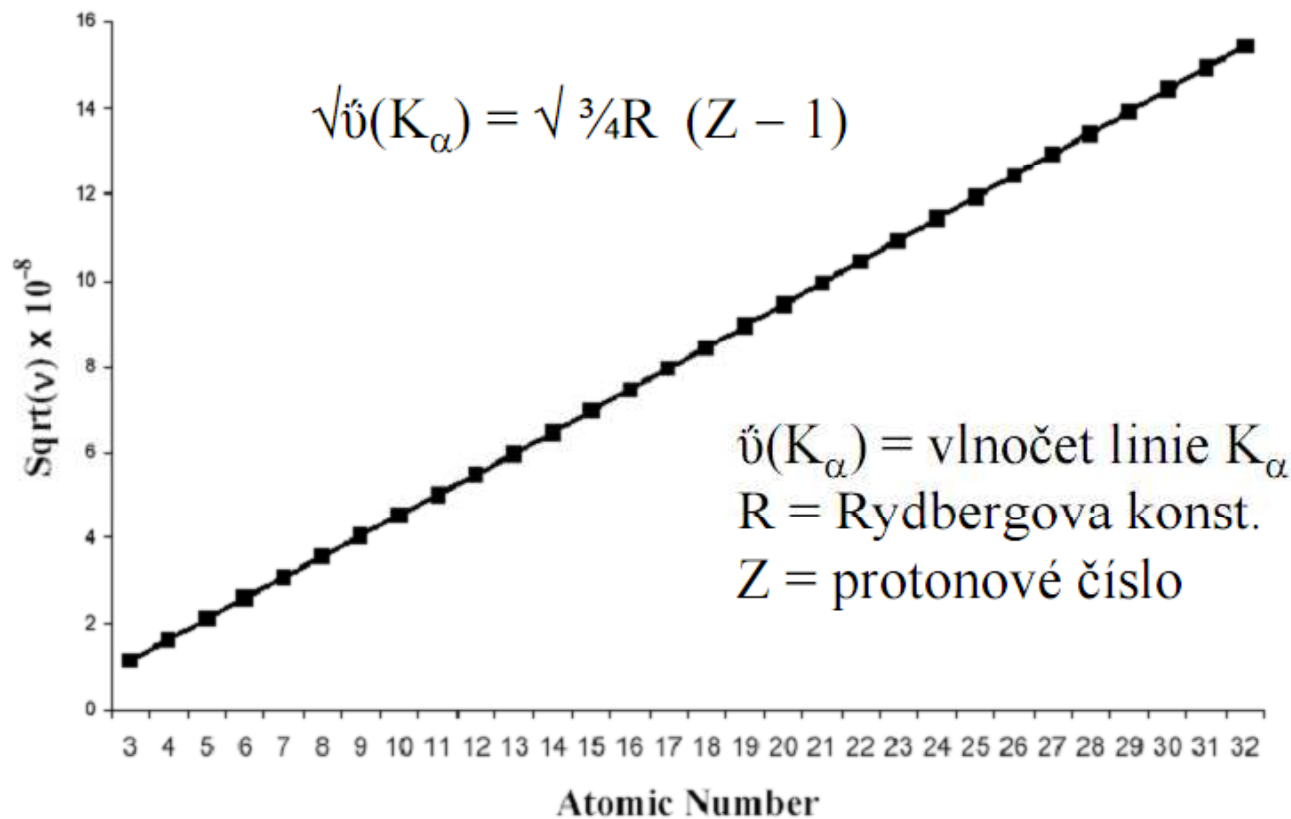


$$m_{12} = R(Z - s)^2 \left( \frac{1}{r_{2a}^2} - \frac{1}{r_{1a}^2} \right)$$



# Moseleyho zákon

X-Ray Frequencies vs. Atomic Number



Henry Moseley  
(1887-1915)

Zabit ostřelovačem

Atomové číslo prvku je rovno počtu protonů v jádře.

Důkaz, že číslo  $Z$  není jen pořadovým číslem, ale že má i fyzikální smysl, při studiu charakterist. záření rtg lamp, jejichž antikatody byly z různých prvků, našel vztah mezi pořadovým číslem prvku  $Z$  a vlnovou délkou tohoto záření

# Moseleyho zákon

1913

Správné pořadí prvků v periodickém systému

Co 58.933

Ni 58.71

Předpověděl prvky:

$Z = 43, 61, 75$

Vlastnosti prvku závisí na protonovém čísle a ne na atomové hmotnosti

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

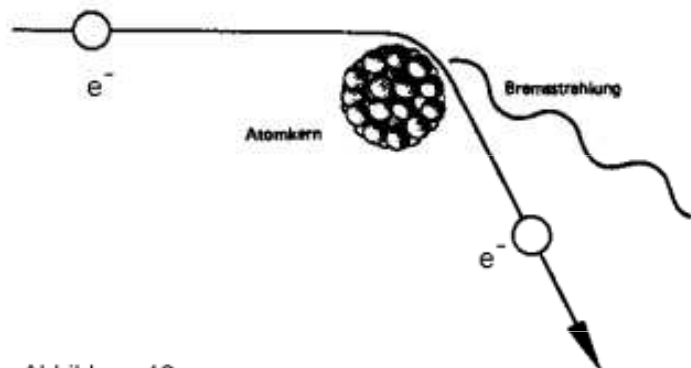
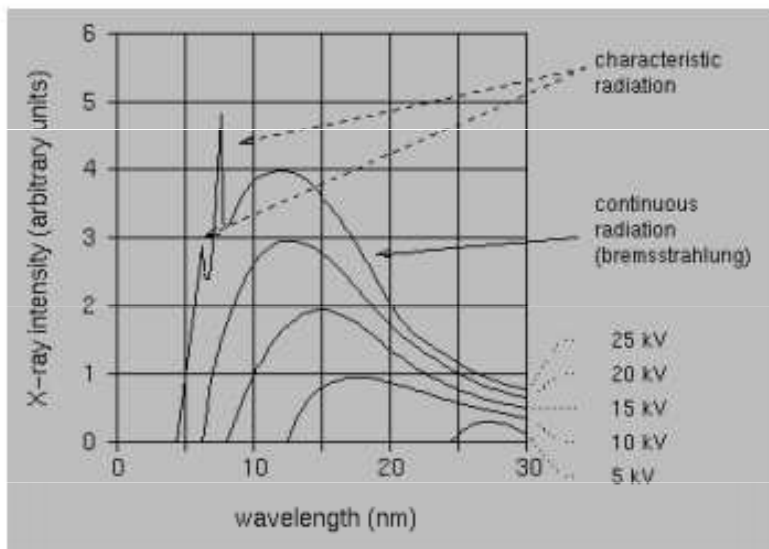


Abbildung 13:

Zur Bremsstrahlung

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



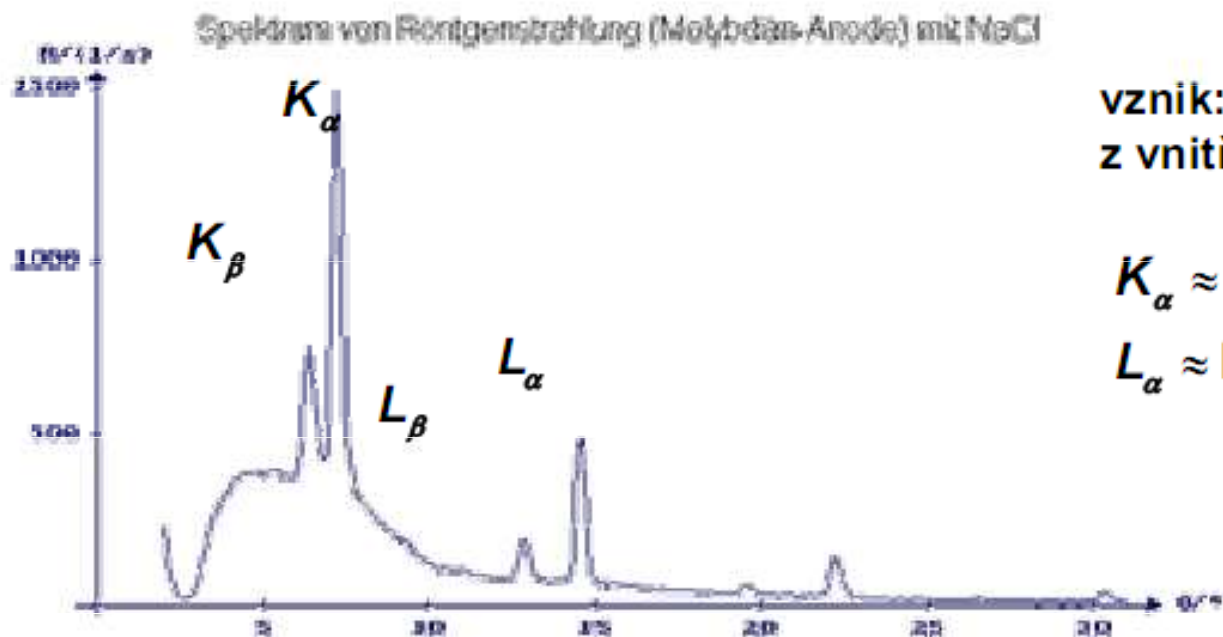
$$eU = h\nu \Rightarrow \lambda_{\min} = \frac{hc}{eU}$$

krátkovlnná hranice

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



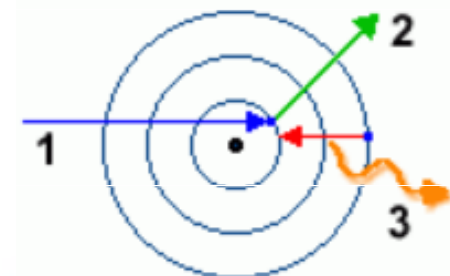
b) charakteristické záření: čárové spektrum, závisí na materiálu antikatody



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:

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

## Shrnutí:

Z anody vystupuje obecně rentgenové záření dvojího druhu - brzdné a charakteristické.

**Brzdné záření** – rychlé elektrony se dopadem na anodu náhle zbrzdí a jejich kinetická energie se přemění na energii fotonů elmg. záření.

Toto záření obsahuje fotony všech vlnových délek, počínaje tzv. mezní vlnovou délkou  $L_m$ . Spektrum brzdného záření je **spojité**.

**Charakteristické záření** - elektron dopadající na anodu může vyrazit některý elektron z nejnižších hladin **K** nebo **L** atomu materiálu anody.

Toto náhle neobsazené místo je okamžitě obsazeno jiným elektronem z vnějších hladin za vyzáření fotonu rentgenového záření s energií rovnou energetickému rozdílu mezi elektronovými hladinami.

Charakteristické záření má proto **čárové spektrum**, které je závislé na materiálu anody.



# Molekuly – stavba a spektrum

## 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,

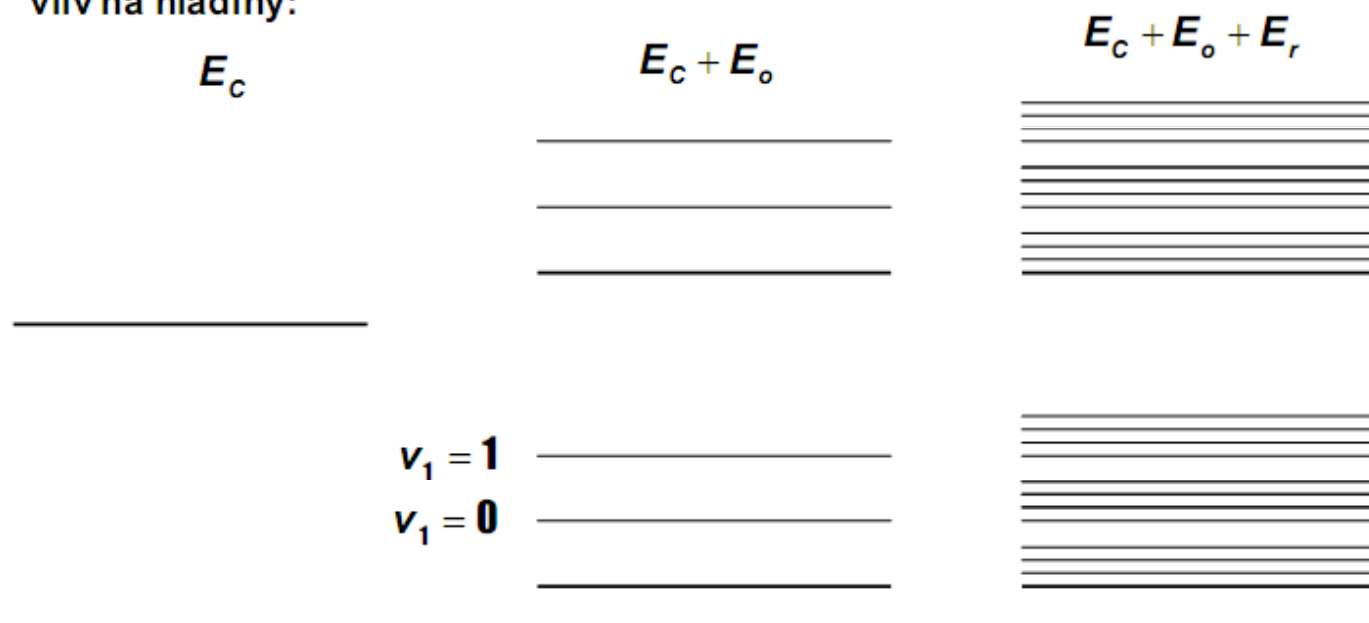
$E_o$  – energie kmitání (oscilace)

z výpočtů:  $\Delta E_C \gg \Delta E_o \gg \Delta E_r$

další komplikace:  $I$  (moment setrvačnosti) je závislý na kmitání,

v není celočíselné, protože vazebné síly nejsou přesně elastické

vliv na hladiny:



z jedné čáry vzniká molekulární pás čar