

6. přednáška
Kvantová teorie:

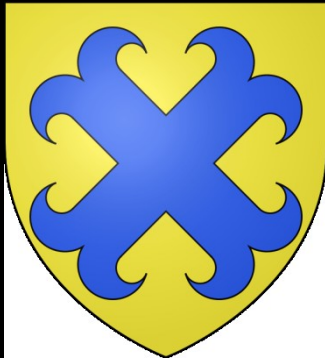
Částice v jednoroměrné potenciálové jámě
lont typu vodíku

Atkins: Výběr z kapitol 7-9

7.1.2.2 Vlnové vlastnosti částic

* 1892 Dieppe

+ 1987 Louveciennes



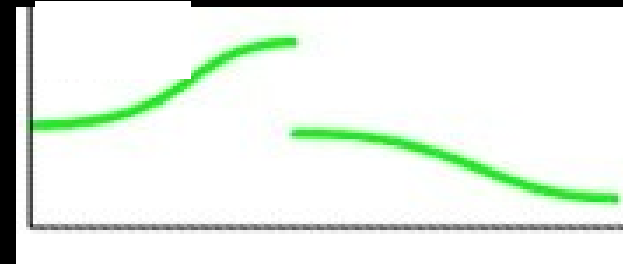
Louis Victor Pierre Raymond vévoda (7.) de Broglie,

7.2.2.1 Postulát o vlnové funkci

a matematické požadavky na



Jednoznačnost

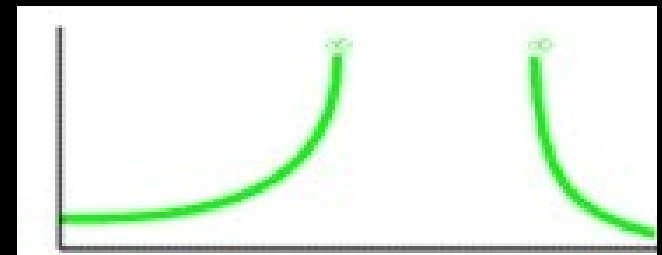


Spojitosť

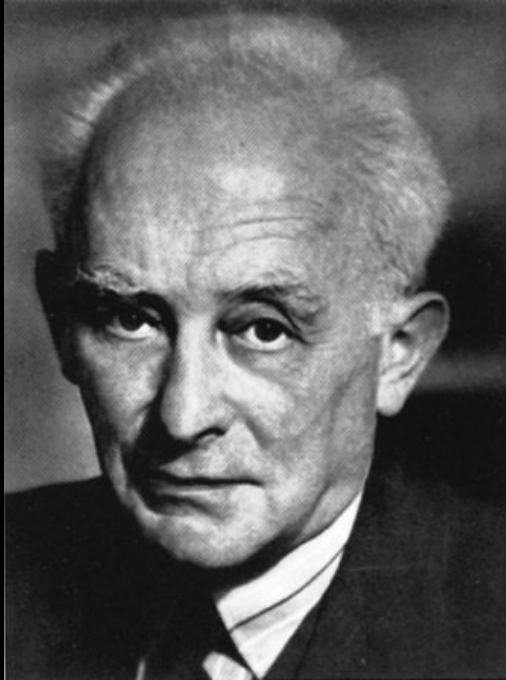


Spojitosť — až na singularity

Integrovatelnost | |



3 z 10 nositelů Nobelovy ceny z města Wrocław/ Breslau /Vratislav



Max Born (1882-1970)

německo-britský M+F



Fritz Haber (1868-1934)

německý CH

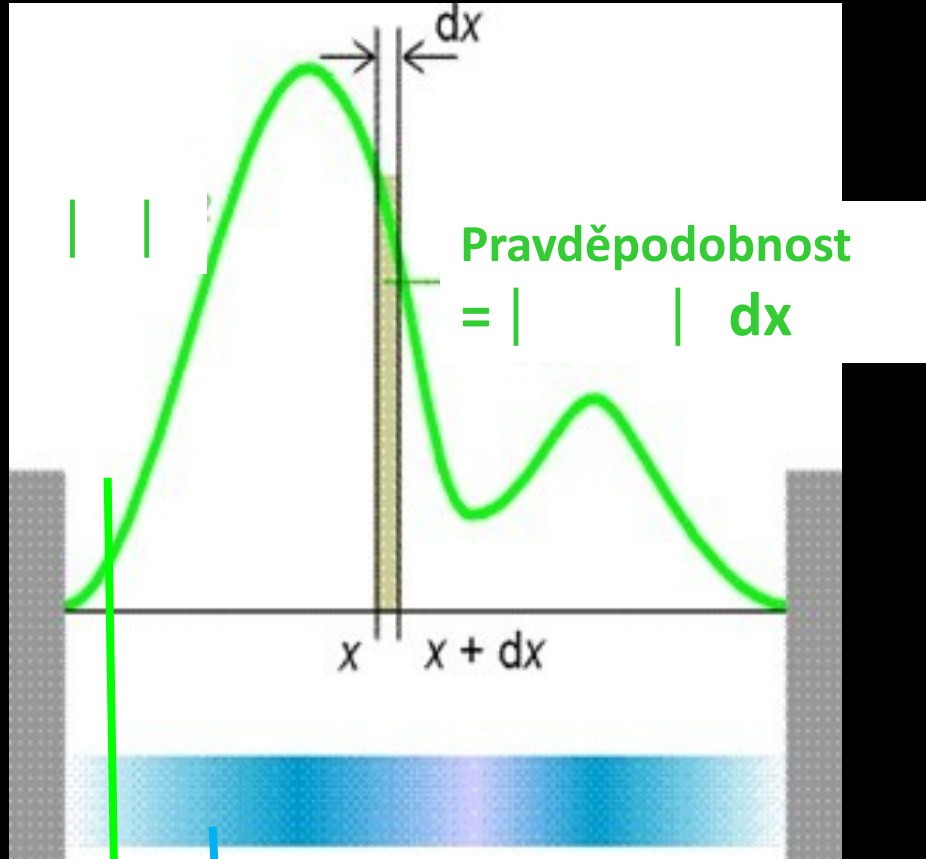


Otto Stern (1888-1969)

německo-americký F

7.2.2 Bornova interpretace:

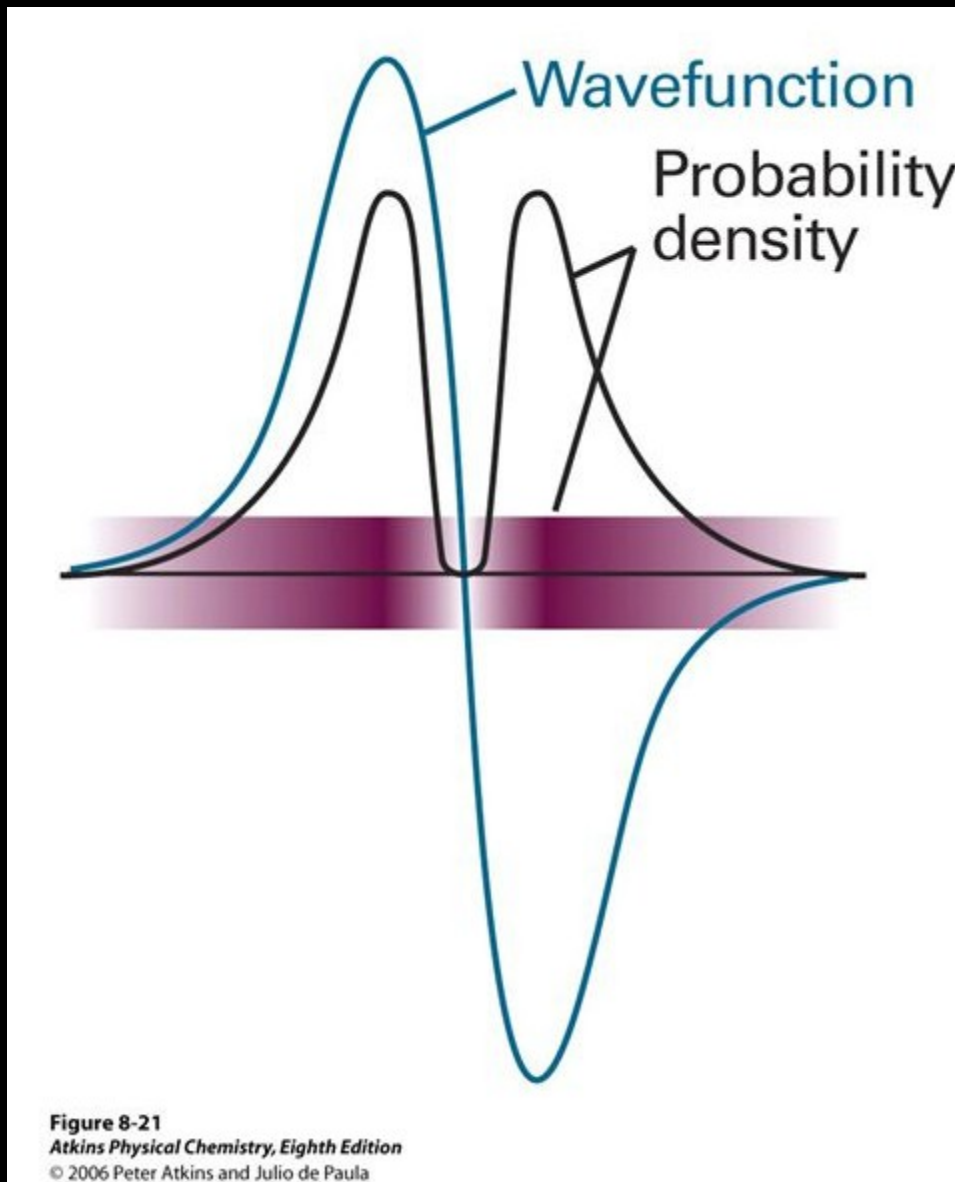
V



HUSTOTA pravděpodobnosti
výskytu částice

Obrázek 7.18

7.2.2.1 Normování vlnové funkce



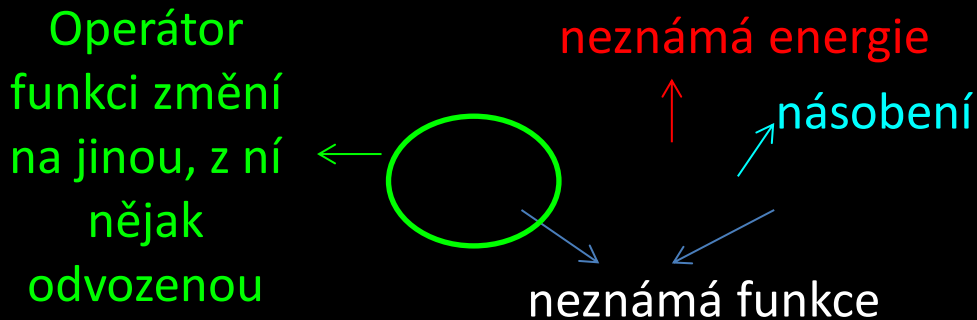
Chovají-li se částice jako vlny, pozbýváme ostré informace o jejich chování (x, y, z, p_x, p_y, p_z).

Musí nám stačit spojitý popis = popis pomocí funkcí.

7.2.1 Schrödingerova rovnice

Vlnové funkce pro konkrétním hladiny energie:
Použijeme tzv. operátor energie, tradičně značený \hat{H} (od „Hamiltonův operátor“).

Kvantově: řeším 1 rovnici o 2 neznámých:

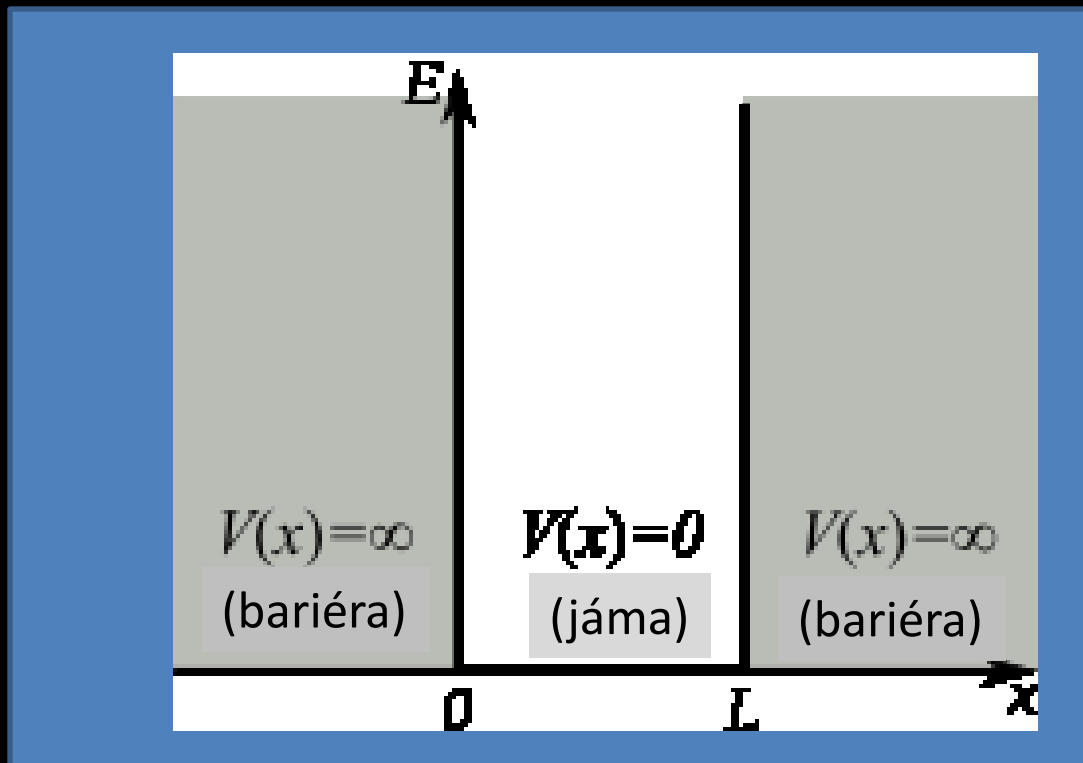


Sir William R. Hamilton

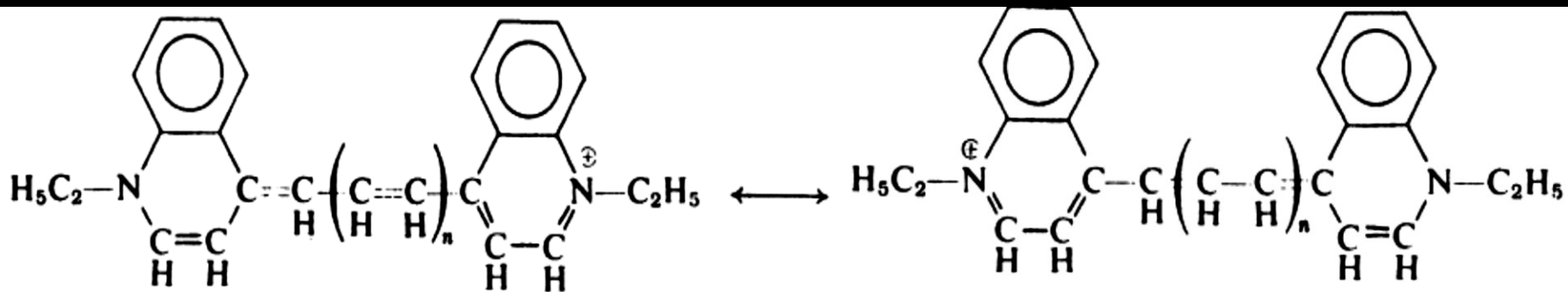


1805-1865, Irský M, F a ASTR
přeformuloval klasickou
mechaniku
na abstraktnější úrovni

8.1.1 Částice v potenciálové jámě (nekonečné hloubky)



Aplikace modelu částice v jámě v OrgCh

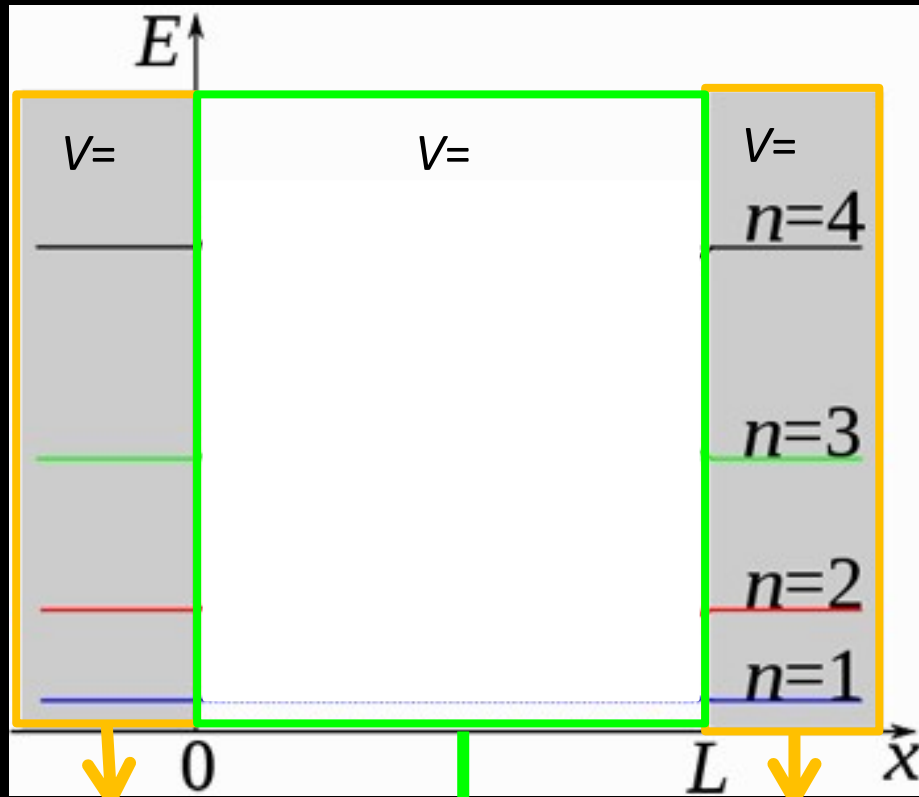


Konjugované systémy dvojných vazeb – výpočet vzdálenosti HOMO a LUMO

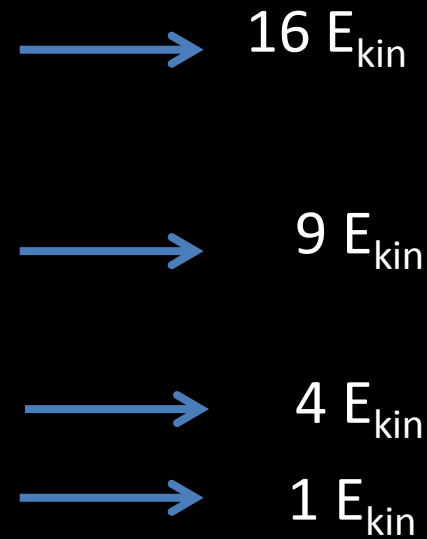
(jednoduchý příklad ve cvičení)

F

Zakřivení
vlnové
funkce:
míra E_{kin}



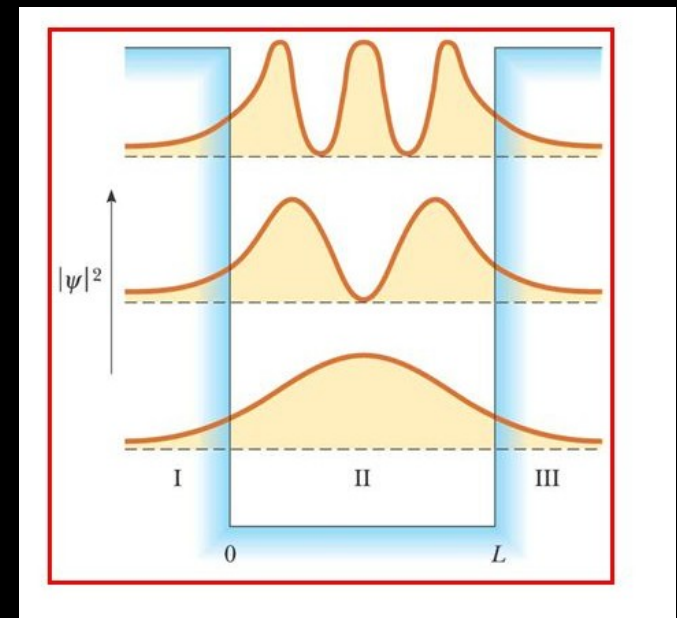
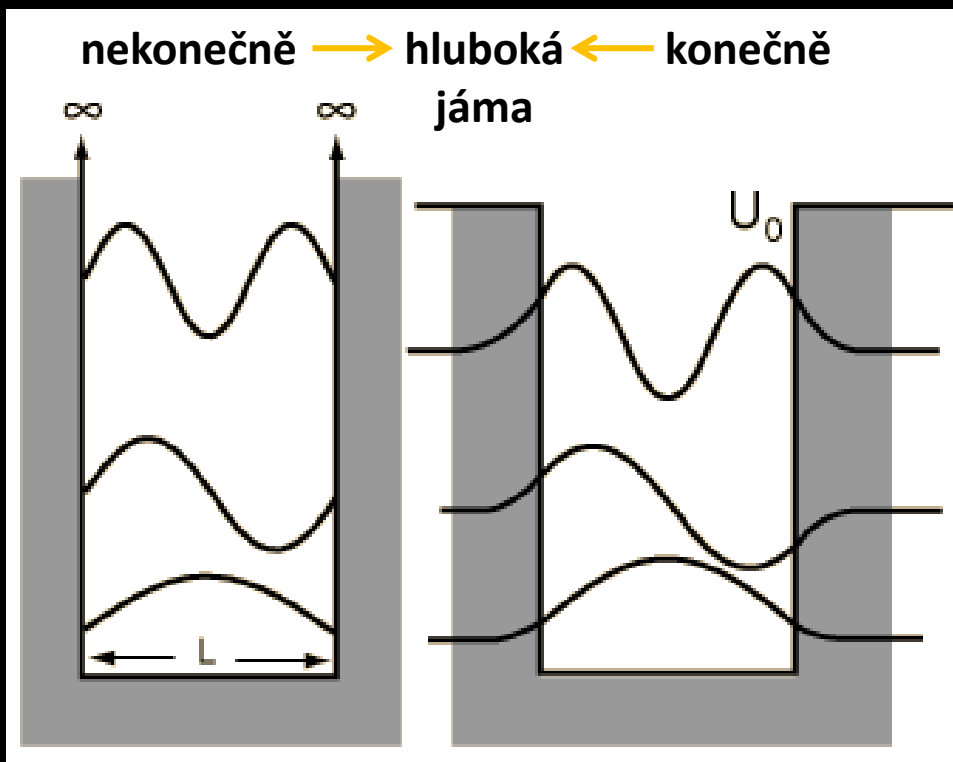
=0 (energeticky nedostupná oblast)



Neznám ale periodu.

Který požadavek na fyzikální přijatelnost mi ji pomůže určit?

8.1.3 Tunelování



Pojem Atomového Orbitalu (AO)

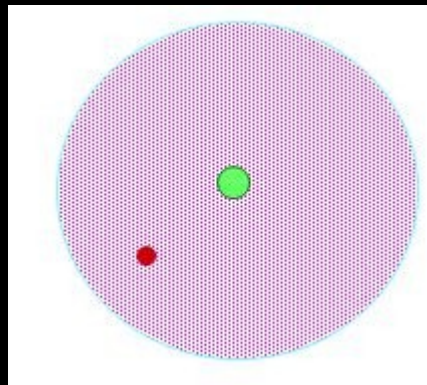
Atomový orbital = **vlňová funkce pro 1 elektron**

(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
zprůměrovanou
hustotou
ostatních e^-



Skutečnost:

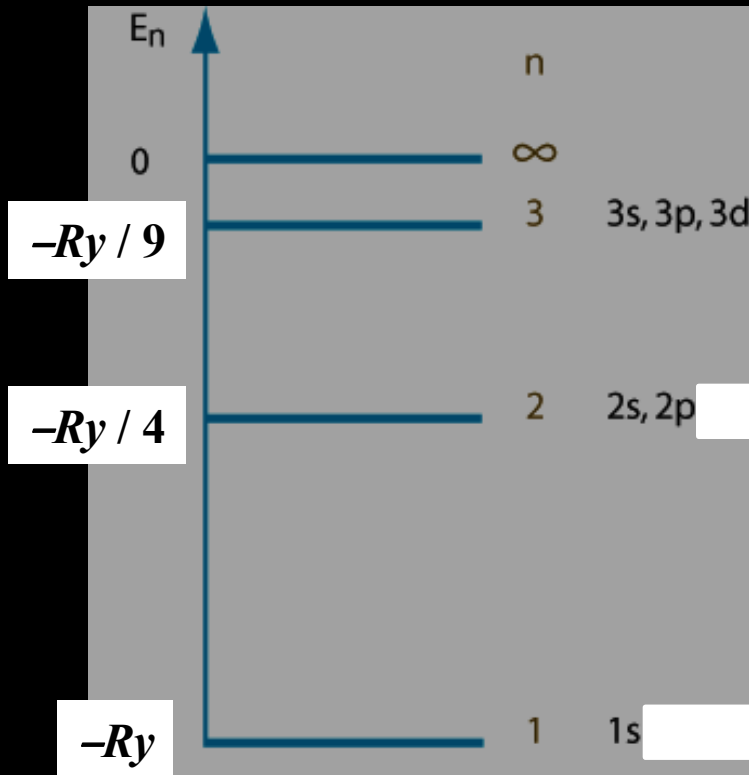


Znevýhodnění

Zvýhodnění

Hladiny energie pro jednotlivé AO

A. Vodík



= 13,6 eV (Rydbergova konstanta)

B. Ionty typu vodíku

Význam kvantových čísel I:
 n ... kvantuje energii

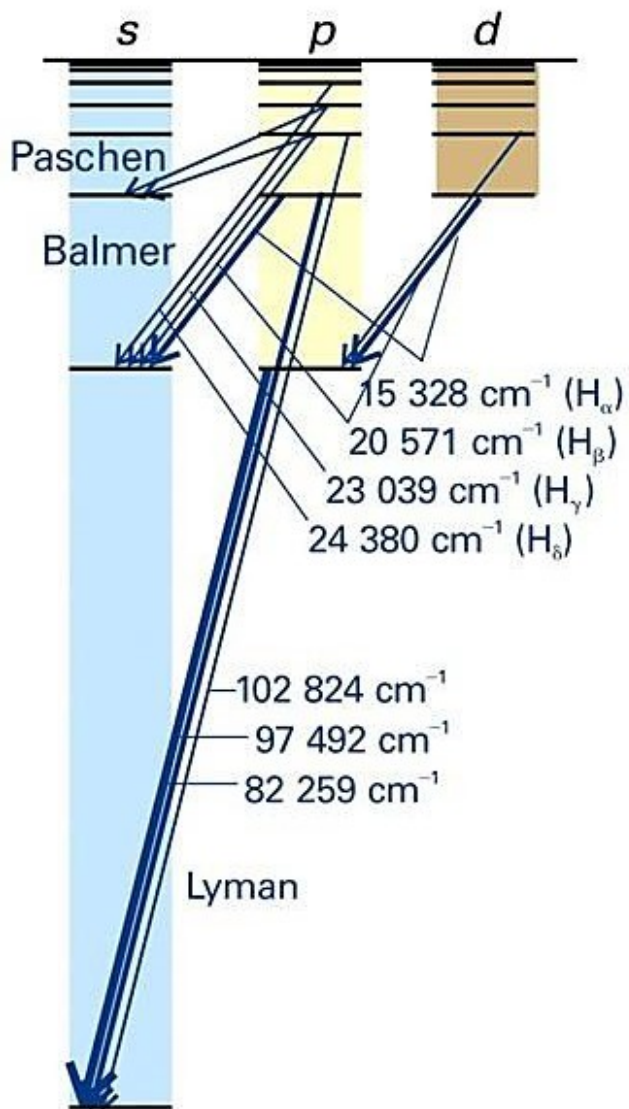


Figure 10-17
 Atkins Physical Chemistry, Eighth Edition
 © 2006 Peter Atkins and Julio de Paula

Obr. 9.17 / Atkins

Grotrianův diagram:
 vzhled + analýza
 spektra atomu H