

3/10/2023

TC12/13

huck

Elektron hmotnost m_e

Harmonický oscilátor

$$\hat{H} \psi = \epsilon \psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 \right) \psi = \epsilon \psi$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega [J]$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k_s}{m}}$$

Vibrační rovnice molekuly

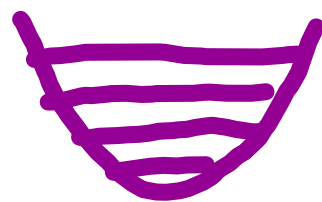
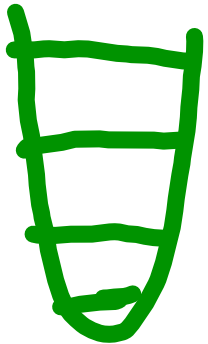
Hubový energie

$m \approx m_e$

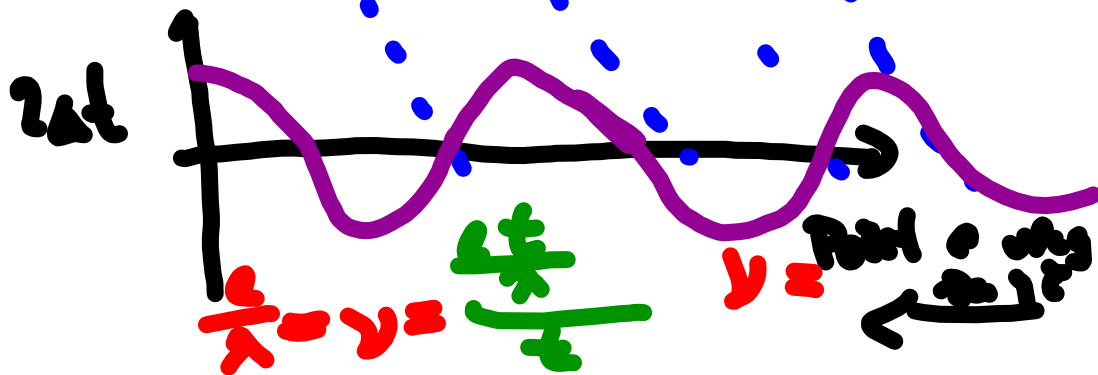
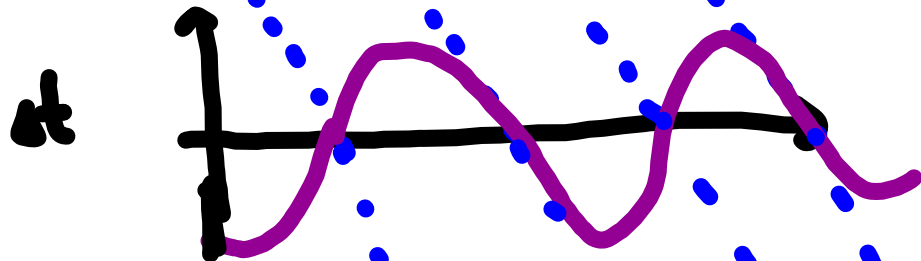
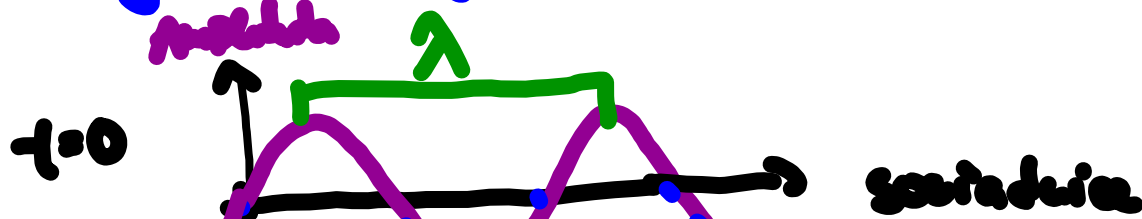
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega [J]$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k_s}{m_{\text{eff}}}}$$

velik k_s ,
velik m



Plošina v smere na vlnočet = perioda hodota λ
 $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$



na čas (t)
 na čelo EM vlny
 posre o vzdialenost

$$x = c \cdot t$$

Koľko cyklov vlny
 to obuhví?

$$\frac{x}{\lambda} = \frac{c \cdot t}{\lambda}$$

Balmerův vlnok

$$\lambda \rightarrow \nu$$

(Angströmův
cm)

$$\nu \propto \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}$$

$$n = 3, 4, 5, \dots$$



odpovídá

(včetně n až na konstantu)

Johan Rydberg

↳ zobecnění Balmerův vlnok

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$n_1 = 1, 2, \dots$$

$$n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots$$

cm

↓

$$R = 3,29 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

cm⁻¹

$$= R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$$

1200



Prekladové dotazy (vlnové)

Q1 Prečo vzniká dĺžka označenia



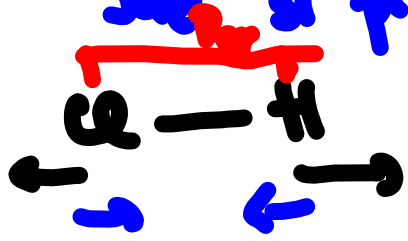
$$\tilde{G}(\omega) = (\omega + \frac{A}{2}) \frac{\hbar\omega}{2\pi c} = \tilde{\nu}$$

a vzniká jeho u frekvencie

$$? = (\omega + \frac{1}{2}) \frac{\hbar\omega}{2\pi} = \nu$$

folow EM záření, který s molekulou interaguje

Q2 Jak se představuje kvantování vlny



V. MZT & Schrödinger atomová a výřil
 S rovnici pro E v atomu vodíku.

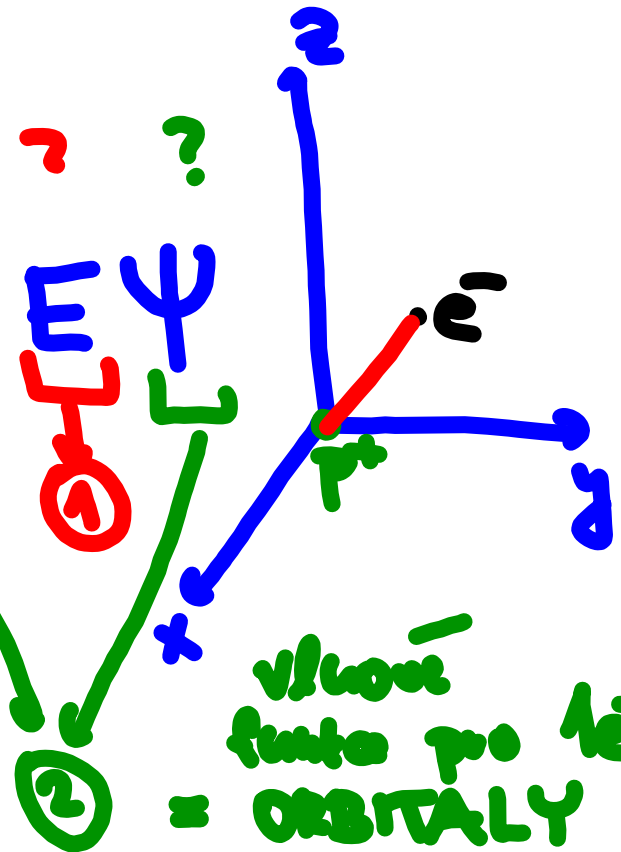
$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + \frac{(-e)(+e)}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \Psi = E\Psi$$

OH výřil E_{kin}

konstanta e

$$\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$



vlnové
 funkce pro $1s$
 = ORBITALY

Energie pro 100 Volts slaty

atom vodika

$E < 0$

ion typu vodika



kon. vyhledat
? atom odskanin
vzorek e^-
krouz
př. nito

$E_n = 0 \frac{h R_{\infty}}{n^2}$

$n = 1, 2, 3,$
krouz krouz vito

$E_n = - \frac{h R_{\infty} Z^2}{n^2}$

R_{∞}

Schrodinger
=

$\frac{m_e e^4}{8 h^3 \epsilon_0^2}$

= R

Rydberg
konst

Atomare orbitale

Orbitale

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$$

Radialteil

Winkelteil
(angulär)
teil

ψ Ψ ← Winkelteil
VF
VF \uparrow ρ $1-\epsilon$