

Obsah

Předmluva autora	7
1 Atomy	9
1.1 Historické okénko	10
1.2 Atomová spektra	16
1.3 Objev elektronu a první modely atomu	22
1.4 Rutherfordův pokus, planetární model atomu	34
1.5 Bohrovův model atomu	47
1.5.1 Franckův–Hertzův experiment	51
1.5.2 Vodíku podobné ionty	53
1.6 Kvantově mechanický popis atomu	56
1.6.1 Kvantová čísla	58
1.6.2 Výběrová pravidla	60
1.6.3 Orbitály	63
1.6.4 Zeemanův jev	64
1.6.5 Spin, Sternův–Gerlachův pokus	71
1.6.6 Elektronová konfigurace atomů	75
1.6.7 Výstavbový princip, Pauliho vylučovací princip	75
1.6.8 Hartree a Hartree–Fockovy rovnice	76
1.6.9 Poloměry atomů a ionizační energie	78
1.6.10 Hundova pravidla	82
1.6.11 Spin–orbitální vazba	83
1.6.12 Anomální Zeemanův jev	88
2 Molekuly a jejich struktura	99
2.1 Popis molekul	99
2.2 Symetrie molekul	103
2.2.1 Bodové grupy	108
2.2.2 Maticové vyjádření operací symetrie	111
2.3 Meziatomové potenciály	114

2.4	Molekulová spektra – vibrace a rotace	117
2.4.1	Rotační hladiny dvouatomových molekul	117
2.4.2	Rotační hladiny víceatomových molekul	121
2.4.3	Rotační spektra	124
2.4.4	Vibrační spektra molekul	129
2.4.5	Rotačně-vibrační spektra molekul	131
2.4.6	Infračervená spektroskopie – dipólová aproximace .	136
2.4.7	Kvantový popis rotací a vibrací molekul	137
2.5	Měrné teplo molekul	143
3	Struktura pevných látek	153
3.1	Krystalické látky	153
3.1.1	Elementární mříž	156
3.2	Krystalové soustavy, elementární mřížky a prostorové grupy ve 2D	157
3.3	Krystalové soustavy ve 3D	160
3.3.1	Bravaisovy mříže	163
3.3.2	Prostorové grupy	164
3.4	Symetrie a vlastnosti látek	168
3.4.1	Neumannův princip	171
3.4.2	Voigtův princip	172
3.4.3	Curieův princip	173
3.5	Metody přípravy krystalů	175
3.5.1	Krystalizace z nasyceného roztoku	175
3.5.2	Růst krystalu z plynné fáze	179
3.5.3	Bridgmanova metoda	180
3.5.4	Czochralského metoda	181
3.6	Metody studia struktury pevných látek	182
3.6.1	Difrakce rentgenového záření	183
3.6.2	Laueovy difrakční podmínky	185
3.6.3	Symetrie a difrakce	187
3.6.4	Reciproký prostor	188
3.6.5	Millerovy a difrakční indexy	195
3.6.6	Braggova difrakční podmínka	196
3.6.7	Ekvivalence Braggovy a Laueových difrakčních podmínek	198
3.6.8	Ewaldova konstrukce	200
3.6.9	Laueova metoda	200
3.6.10	Braggova metoda	206

3.6.11	Strukturní faktor	210
3.7	Reálná struktura	220
3.7.1	Debyeův vztah	223
3.7.2	Amorfni a neuspořádané látky, korelační funkce	226
3.7.3	Kvazikrystaly	229
4	Dualismus vlna-částice	235
4.1	Fotoelektrický jev	235
4.2	Comptonův rozptyl	239
4.3	de Broglieho hypotéza	242
4.4	Vlnové vlastnosti hmotných částic	244
4.4.1	Disperzní relace pro hmotnou částici	245
4.4.2	Difrakce elektronů	247
4.4.3	Difrakce neutronů	254
4.4.4	Strukturní faktory pro rozptyl rtg. záření, elektronů a neutronů	257
4.5	Dvojtěrbínový experiment	260
4.6	Mikroskopy	264
4.6.1	Elektronový mikroskop (SEM, TEM)	264
4.6.2	Řádkovací elektronový mikroskop (SEM)	264
4.6.3	Transmisní elektronový mikroskop (TEM)	268
4.6.4	Řádkovací tunelový mikroskop (STM)	270
4.6.5	Mikroskop atomových sil (AFM)	272
5	Měrné teplo pevných látek	279
5.1	Einsteinův model	279
5.2	Debyeův model	281
5.2.1	Jednoatomový řetízek	281
5.2.2	Brillouinovy zóny	283
5.2.3	Dvouatomový řetízek	286
5.2.4	Hustota stavů	295
5.3	Vibrace atomů v krystalové mříži a strukturní faktor	304
5.4	Kvantování kmitů mříže – fonony	310
5.5	Fonony a jejich experimentální studium	311
6	Elektronová struktura molekul a pevných látek	319
6.1	Vznik a typy vazeb mezi atomy	320
6.1.1	Iontová vazba	320
6.1.2	Kovalentní vazba	323
6.1.3	Přiblížení valenční vazby	325

6.2	Molekulové orbitály	329
6.3	Molekula H_2^+ – metoda LCAO	331
6.4	Hybridizace orbitalů	341
6.4.1	hybridizace sp	341
6.4.2	hybridizace sp^2	343
6.4.3	hybridizace sp^3	345
6.5	Kovová vazba	348
6.5.1	Model volných elektronů	348
6.5.2	Model téměř volných elektronů	358
6.5.3	Blochův teorém	359
6.5.4	Kronigův–Penneyův model	366
6.6	Pásová struktura	371
6.6.1	Fermiho plocha a měrné teplo vodivostních elektronů	379
7	Přílohy	385
	Rutherfordův pokus (skript pro Matlab/Octave)	385
	Výzařování elektronu vlivem zrychlení	387
	Výpočet energie základního stavu He	393
	Polarizace záření v normálním Zeemanově jevu	398
	Výpočet jakobiánu přechodu k eliptickým souřadnicím u molekuly H_2^+	405
	Základní fyzikální konstanty	408
	Periodická tabulka prvku	410