

# Obsah

Předmluva autora . . . . .	7
<b>1 Atomy</b>	<b>9</b>
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 Bohrov 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 Orbitaly . . . . .	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
<b>2 Molekuly a jejich struktura</b>	<b>99</b>
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
<b>3</b>	<b>Struktura pevných látek</b>	<b>153</b>
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
<b>4</b>	<b>Dualismus vlna-částice</b> . . . . .	<b>235</b>
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	Dvojštěrbinový 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
<b>5</b>	<b>Měrné teplo pevných látek</b> . . . . .	<b>279</b>
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
<b>6</b>	<b>Elektronová struktura molekul a pevných látek</b> . . . . .	<b>319</b>
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
<b>7</b>	<b>Přílohy</b>	<b>385</b>
	Rutherfordův pokus (skript pro Matlab/Octave) . . . . .	385
	Vyzařování 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