

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 Bohrov model atomu	47
1.5.1 Franckův–Hertzův experiment	51
1.5.2 Vodíku podobné ionty	53
1.5.3 Model valenčního elektronu	56
1.6 Kvantově mechanický popis atomu	61
1.6.1 Kvantová čísla	62
1.6.2 Výběrová pravidla	64
1.6.3 Orbitaly	67
1.6.4 Zeemanův jev	69
1.6.5 Spin, Sternův–Gerlachův pokus	75
1.6.6 Elektronová konfigurace atomů	79
1.6.7 Výstavbový princip, Pauliho vylučovací princip	79
1.6.8 Hartree a Hartree–Fockovy rovnice	80
1.6.9 Poloměry atomů a ionizační energie	83
1.6.10 Hundova pravidla	86
1.6.11 Spin–orbitální vazba	88
1.6.12 Anomální Zeemanův jev	92
2 Molekuly a jejich struktura	103
2.1 Popis molekul	103
2.2 Symetrie molekul	107
2.2.1 Bodové grupy	112
2.2.2 Maticové vyjádření operací symetrie	115

2.3	Meziatomové potenciály	118
2.4	Molekulová spektra – vibrace a rotace	121
2.4.1	Rotační hladiny dvouatomových molekul	121
2.4.2	Rotační hladiny víceatomových molekul	125
2.4.3	Rotační spektra	128
2.4.4	Vibrační spektra molekul	133
2.4.5	Rotačně-vibrační spektra molekul	135
2.4.6	Infračervená spektroskopie – dipólová aproximace .	140
2.4.7	Kvantový popis rotací a vibrací molekul	141
2.5	Měrné teplo molekul	147
3	Struktura pevných látek	157
3.1	Krystalické látky	157
3.1.1	Elementární mříž	160
3.2	Krystalové soustavy, elementární mřížky a prostorové grupy ve 2D	161
3.3	Krystalové soustavy ve 3D	164
3.3.1	Bravaisovy mříže	167
3.3.2	Prostorové grupy	168
3.4	Symetrie a vlastnosti látek	172
3.4.1	Neumannův princip	175
3.4.2	Voigtův princip	176
3.4.3	Curieův princip	177
3.5	Metody přípravy krystalů	179
3.5.1	Krystalizace z nasyceného roztoku	179
3.5.2	Růst krystalu z plynné fáze	183
3.5.3	Bridgmanova metoda	184
3.5.4	Czochralského metoda	185
3.6	Metody studia struktury pevných látek	186
3.6.1	Difrakce rentgenového záření	187
3.6.2	Laueovy difrakční podmínky	189
3.6.3	Symetrie a difrakce	191
3.6.4	Reciproký prostor	192
3.6.5	Millerovy a difrakční indexy	199
3.6.6	Braggova difrakční podmínka	201
3.6.7	Ekvivalence Braggovy a Laueových difrakčních podmínek	202
3.6.8	Ewaldova konstrukce	204
3.6.9	Laueova metoda	205

3.6.10	Braggova metoda	210
3.6.11	Strukturní faktor	214
3.7	Reálná struktura	224
3.7.1	Debyeův vztah	228
3.7.2	Amorfni a neuspořádané látky, korelační funkce	229
3.7.3	Kvazikrystaly	233
4	Dualismus vlna-částice	239
4.1	Fotoelektrický jev	239
4.2	Comptonův rozptyl	243
4.3	de Broglieova hypotéza	246
4.4	Vlnové vlastnosti hmotných částic	248
4.4.1	Disperzní relace pro hmotnou částici	249
4.4.2	Difrakce elektronů	251
4.4.3	Difrakce neutronů	258
4.4.4	Strukturní faktory pro rozptyl rtg. záření, elektronů a neutronů	261
4.5	Dvojtěrbínový experiment	264
4.6	Mikroskopy	268
4.6.1	Elektronový mikroskop (SEM, TEM)	268
4.6.2	Řádkovací elektronový mikroskop (SEM)	268
4.6.3	Transmisní elektronový mikroskop (TEM)	272
4.6.4	Řádkovací tunelový mikroskop (STM)	274
4.6.5	Mikroskop atomových sil (AFM)	276
5	Měrné teplo pevných látek	283
5.1	Einsteinův model	283
5.2	Debyeův model	285
5.2.1	Jednoatomový řetízek	285
5.2.2	Brillouinovy zóny	287
5.2.3	Dvouatomový řetízek	290
5.2.4	Hustota stavů	299
5.3	Vibrace atomů v krystalové mříži a strukturní faktor	308
5.4	Kvantování kmitů mříže – fonony	314
5.5	Fonony a jejich experimentální studium	315
6	Elektronová struktura molekul a pevných látek	323
6.1	Vznik a typy vazeb mezi atomy	324
6.1.1	Iontová vazba	324
6.1.2	Kovalentní vazba	327

6.1.3	Přiblížení valenční vazby	329
6.2	Molekulové orbitaly	333
6.3	Molekula H_2^+ – metoda LCAO	335
6.4	Hybridizace orbitalů	351
6.4.1	hybridizace sp	351
6.4.2	hybridizace sp^2	353
6.4.3	hybridizace sp^3	355
6.5	Kovová vazba	358
6.5.1	Model volných elektronů	358
6.5.2	Model téměř volných elektronů	368
6.5.3	Blochův teorém	369
6.5.4	Kronigův–Penneyův model	376
6.6	Pásová struktura	382
6.6.1	Fermiho plocha a měrné teplo vodivostních elektronů	390
7	Přílohy	395
	Rutherfordův pokus (skript pro Matlab/Octave)	395
	Vyzařování elektronu vlivem zrychlení	397
	Výpočet energie základního stavu He	403
	Polarizace záření v normálním Zeemanově jevu	408
	Výpočet jakobiánu přechodu k eliptickým souřadnicím u molekuly H_2^+	415
	Základní fyzikální konstanty	418
	Periodická tabulka prvku	420