

Kvantová, atómová a subatómová fyzika

Stavba atómov
Chemická väzba

Literatúra: M. Medved', M. Skoršepa, Š. Budzák: Teória chemickej väzby, Belianum, 2013

Pauliho vylučovací princíp

Platí pre častice s polčíselným spinom: elektrón, protón, neutrón, ...
(My sme mali častice s $s = 1/2$, ale existujú aj so spinom $3/2, 5/2...$)
Takéto častice nazývame **fermióny**.

Žiadne dva fermióny nemôžu byť v rovnakom kvantovom stave.

Čo to znamená:

- ak máme viacero fermiónov (napr. elektrónov) v nejakej potenciálovej jame (pravouhlá nekonečná, pravouhlá konečná, LHO, atóm vodíka, ...), potom sady kvantových čísel, ktoré popisujú ich stavu, musia byť od seba odlišné
- vlnové funkcie ľubovoľných dvoch elektrónov musia byť od seba odlišné

Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$
 \Rightarrow v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

V troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Obsadzovanie stavov neinteragujúcimi fermiónmi

kvantové čísla	násobok energie	degenerácia (so spinom)	celkovo fermiónov
3 2 2	17	6	40
3 2 1	14	12	34
2 2 2	12	2	22
3 1 1	11	6	20
2 2 1	9	6	14
2 1 1	6	6	8
1 1 1	3	2	2

Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$
 \Rightarrow v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

V troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Obsadzovanie stavov neinteragujúcimi fermiónmi

kvantové čísla	násobok energie	degenerácia (so spinom)	celkovo fermiónov
3 2 2	17	6	40
3 2 1	14	12	34
2 2 2	12	2	22
3 1 1	11	6	20
2 2 1	9	6	14
2 1 1	6	6	8
1 1 1	3	2	2

Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$
 \Rightarrow v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

V troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Obsadzovanie stavov neinteragujúcimi fermiónmi

kvantové čísla	násobok energie	degenerácia (so spinom)	celkovo fermiónov
3 2 2	17	6	40
3 2 1	14	12	34
2 2 2	12	2	22
3 1 1	11	6	20
2 2 1	9	6	14
2 1 1	6	6	8
1 1 1	3	2	2

Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$
 \Rightarrow v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

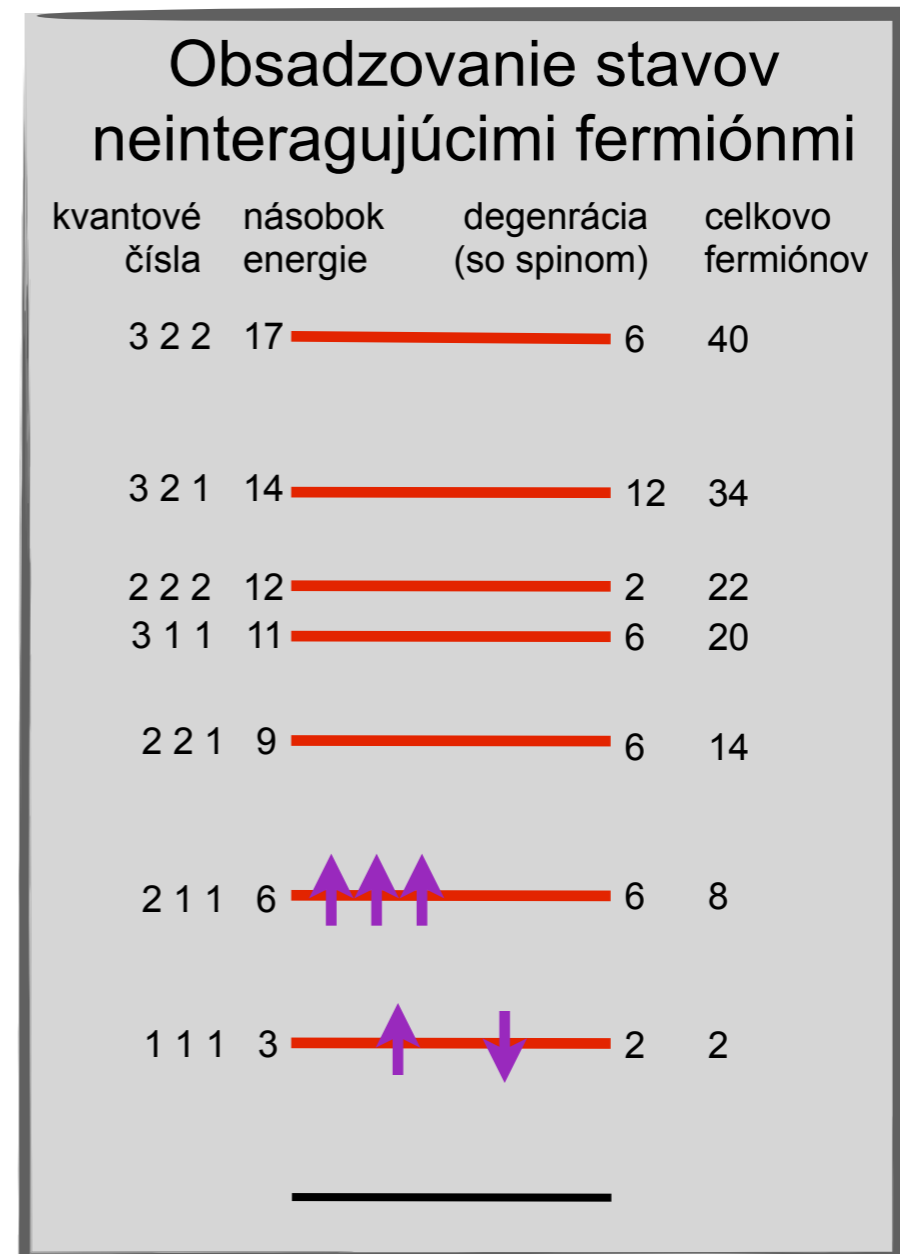
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

V troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$



Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$
 \Rightarrow v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

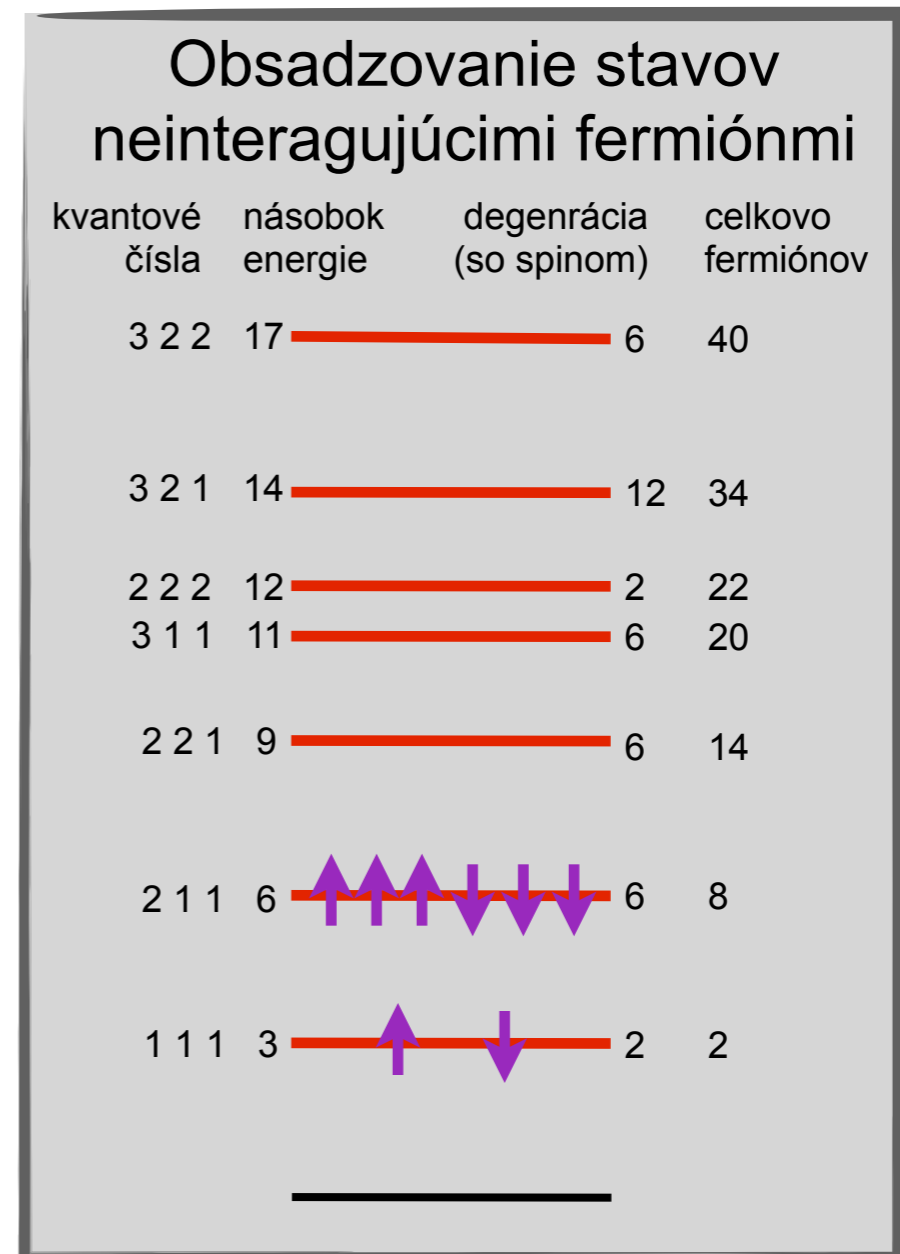
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

V troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$



Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$

⇒ v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

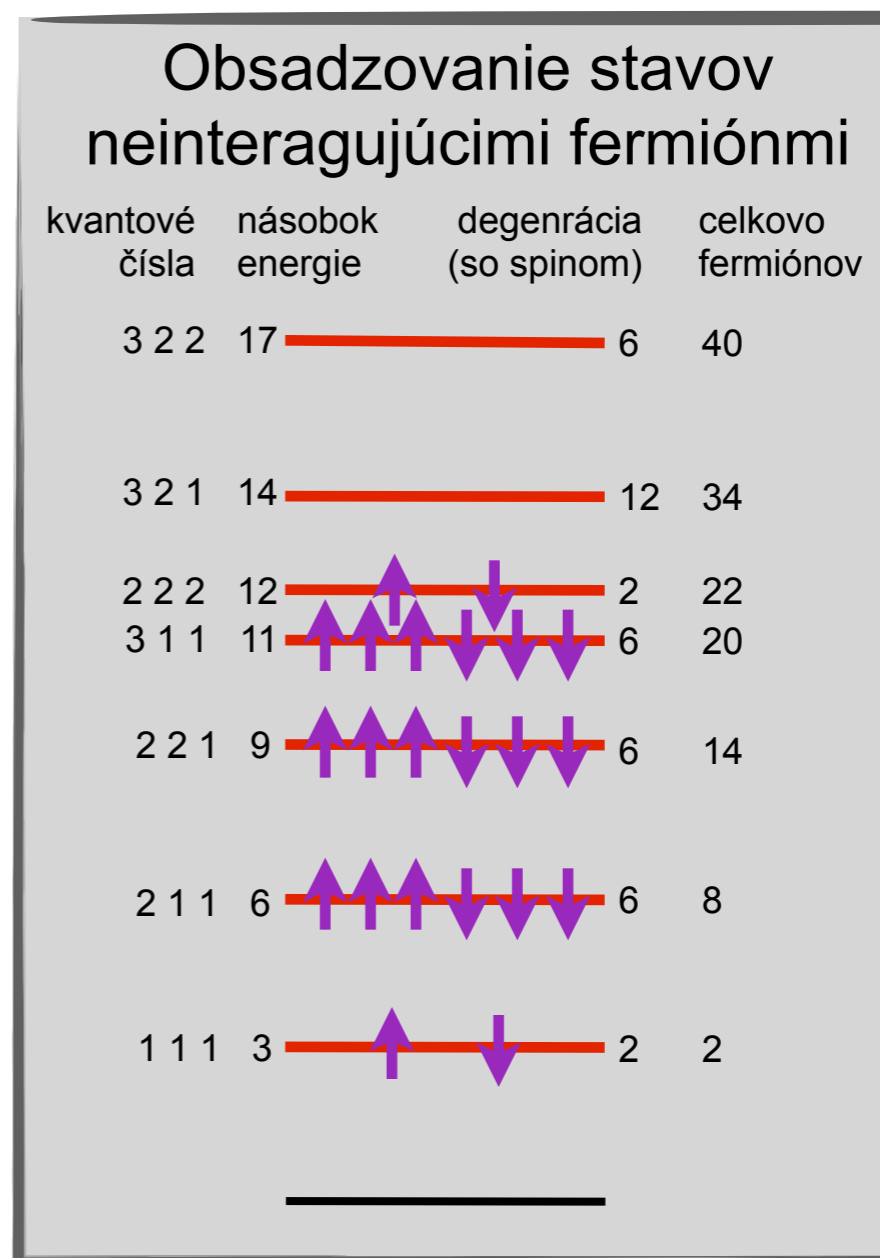
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

V troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$



Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$
 \Rightarrow v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

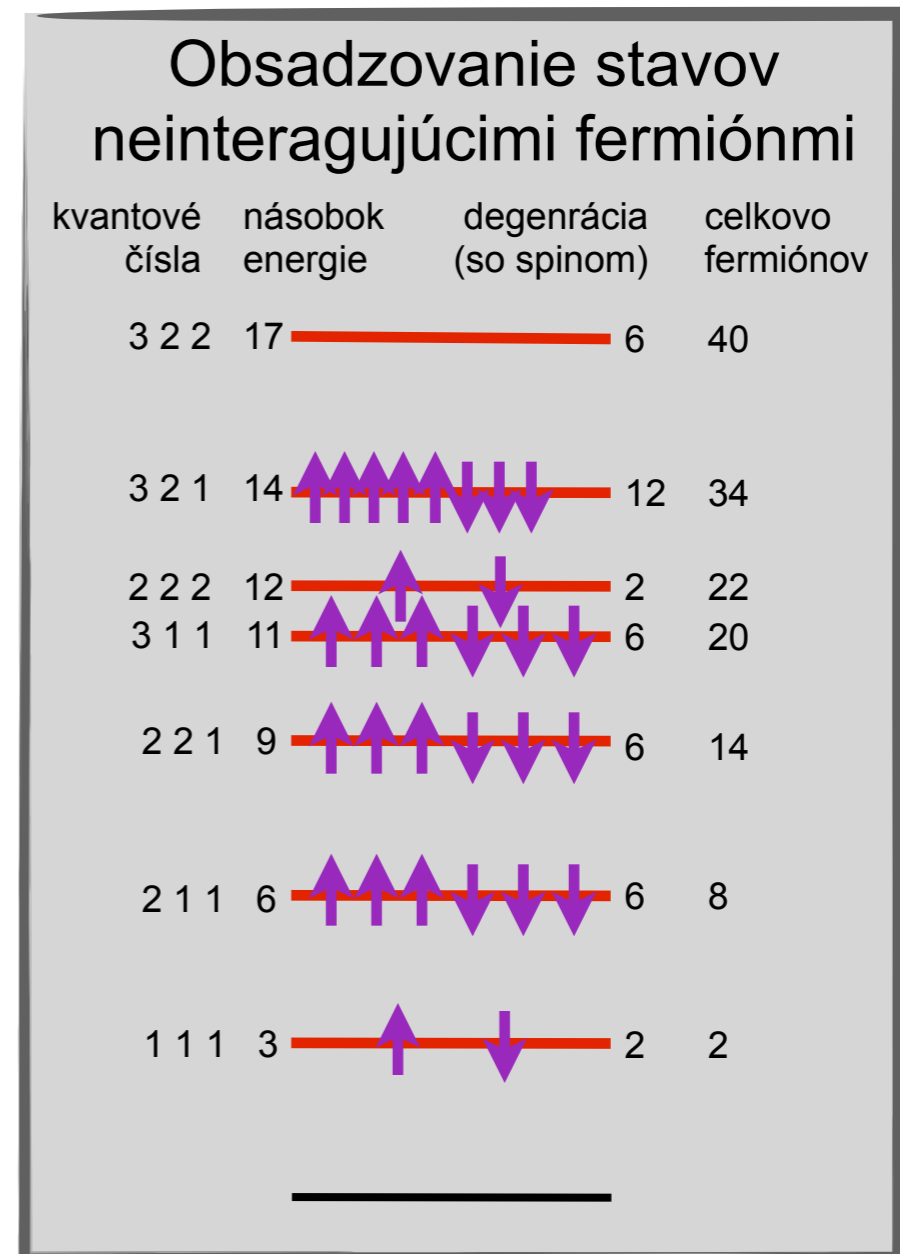
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

V troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$



Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$
 \Rightarrow v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

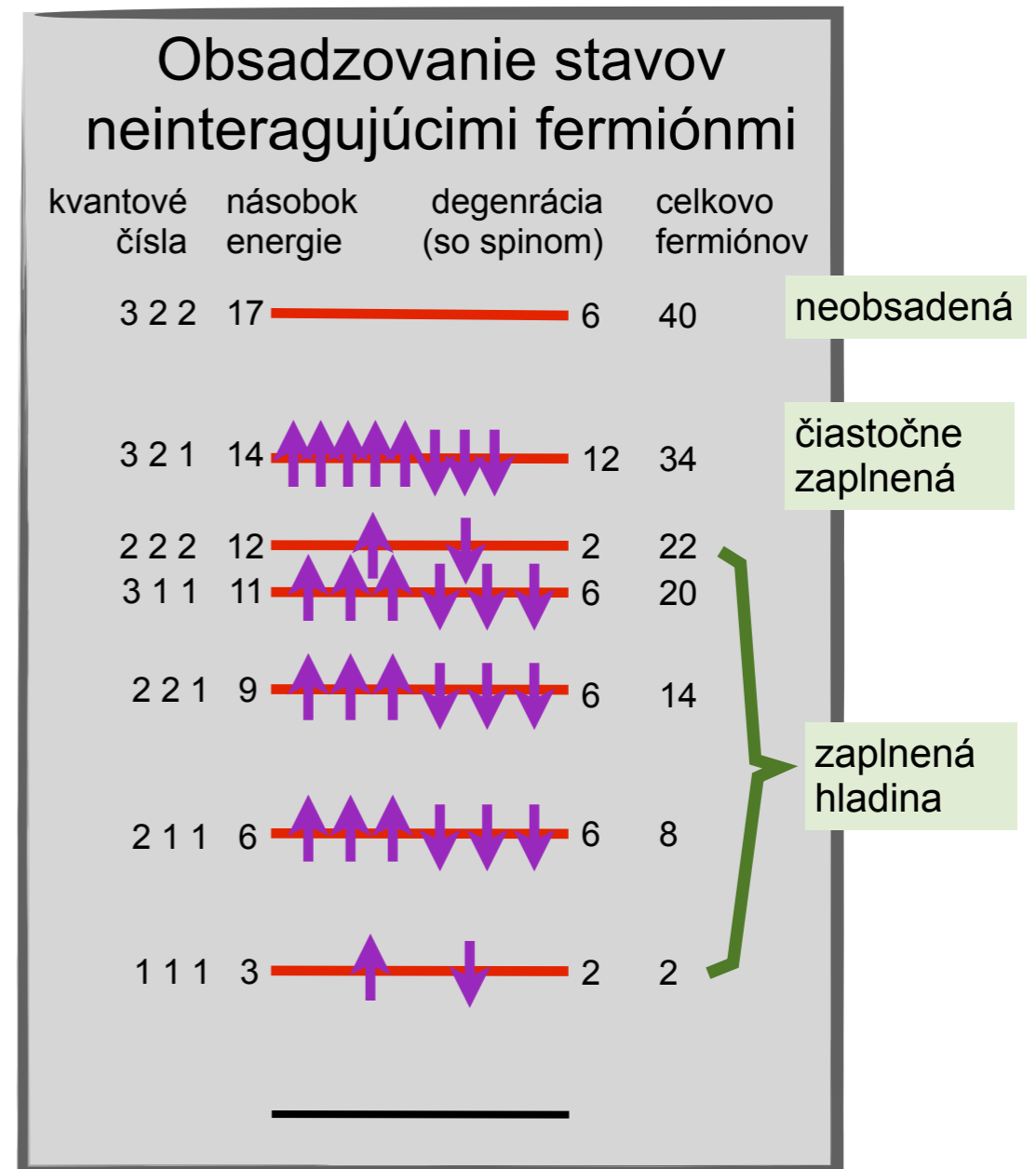
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

V troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$



Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$
 \Rightarrow v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

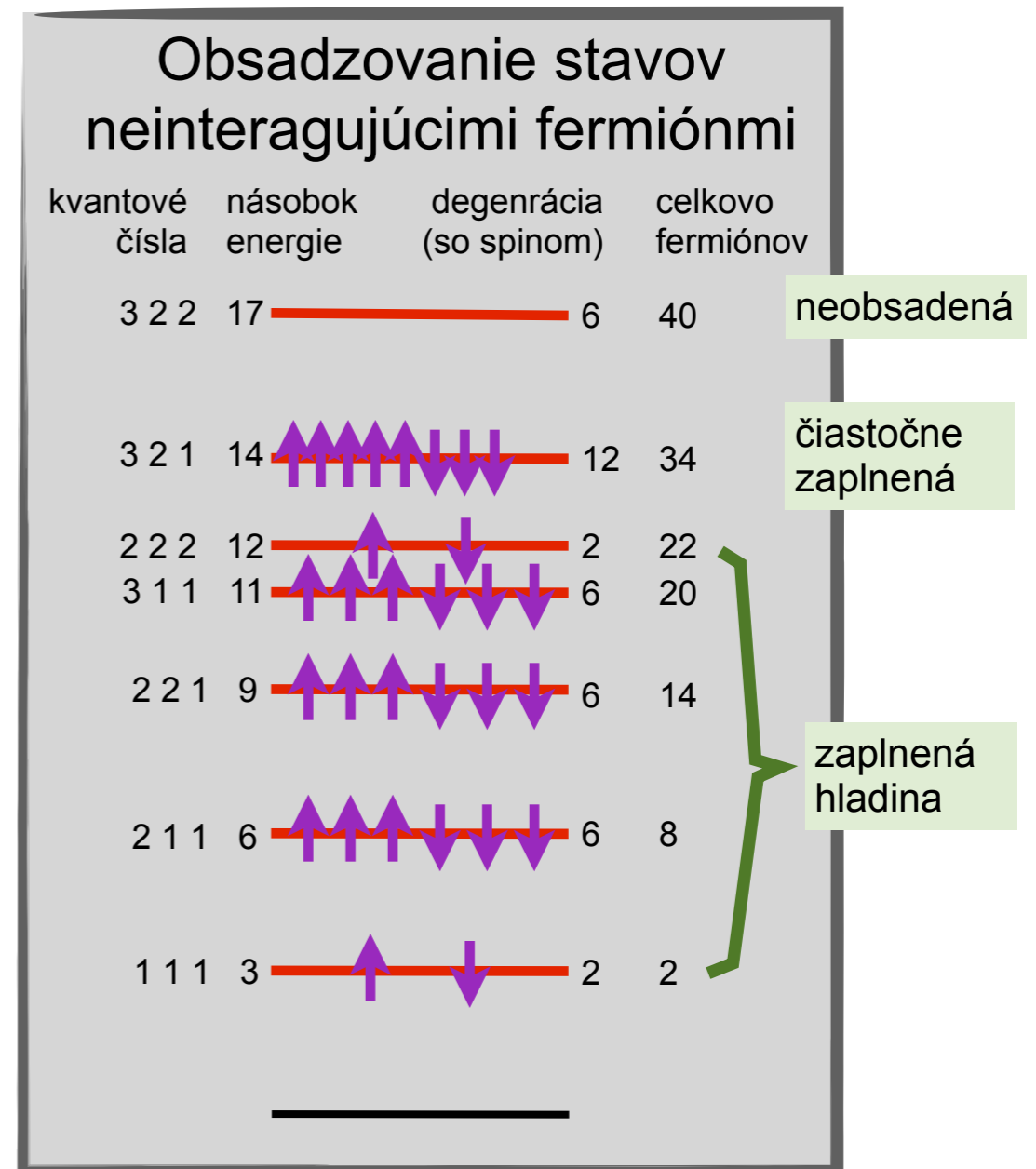
V troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Celková energia: súčet všetkých energií



Pravouhlá jama s mnohými elektrónmi

Elektróny majú dva stavy s rozdielnym priemetom spinu na os z: $s_z = \pm 1/2$
 \Rightarrow v jednom kvantovom stave, o akých sme hovorili, môžu byť najviac dva elektróny a musia sa líšiť hodnotou s_z

V jednom rozmere

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

V troch rozmeroch

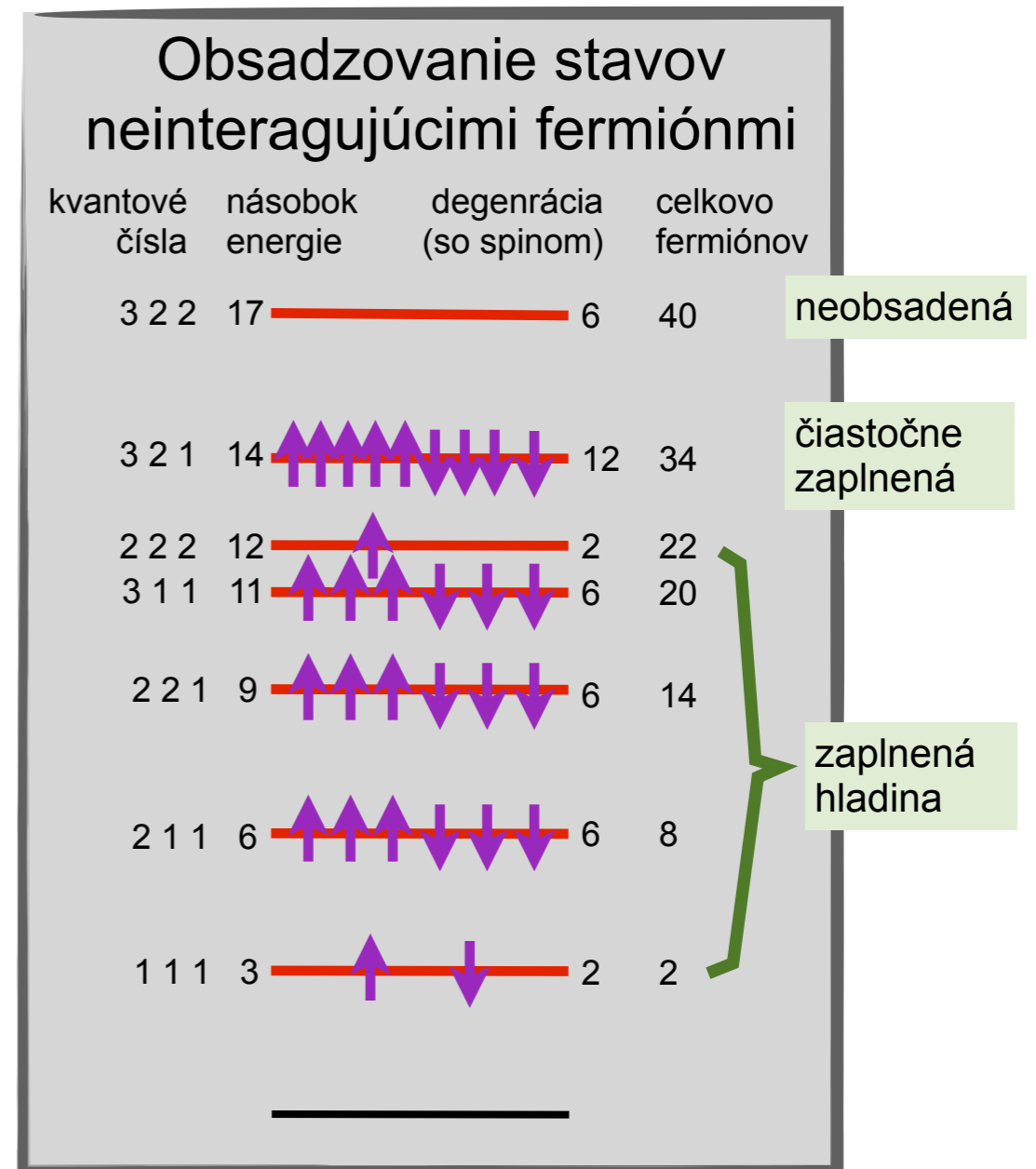
$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Všetky tri rozmery rovnaké

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Celková energia: súčet všetkých energií

Najmenšia excitácia:
 preskok s najmenším možným rozdielom
 medzi energetickými hladinami



Periodická sústava prvkov

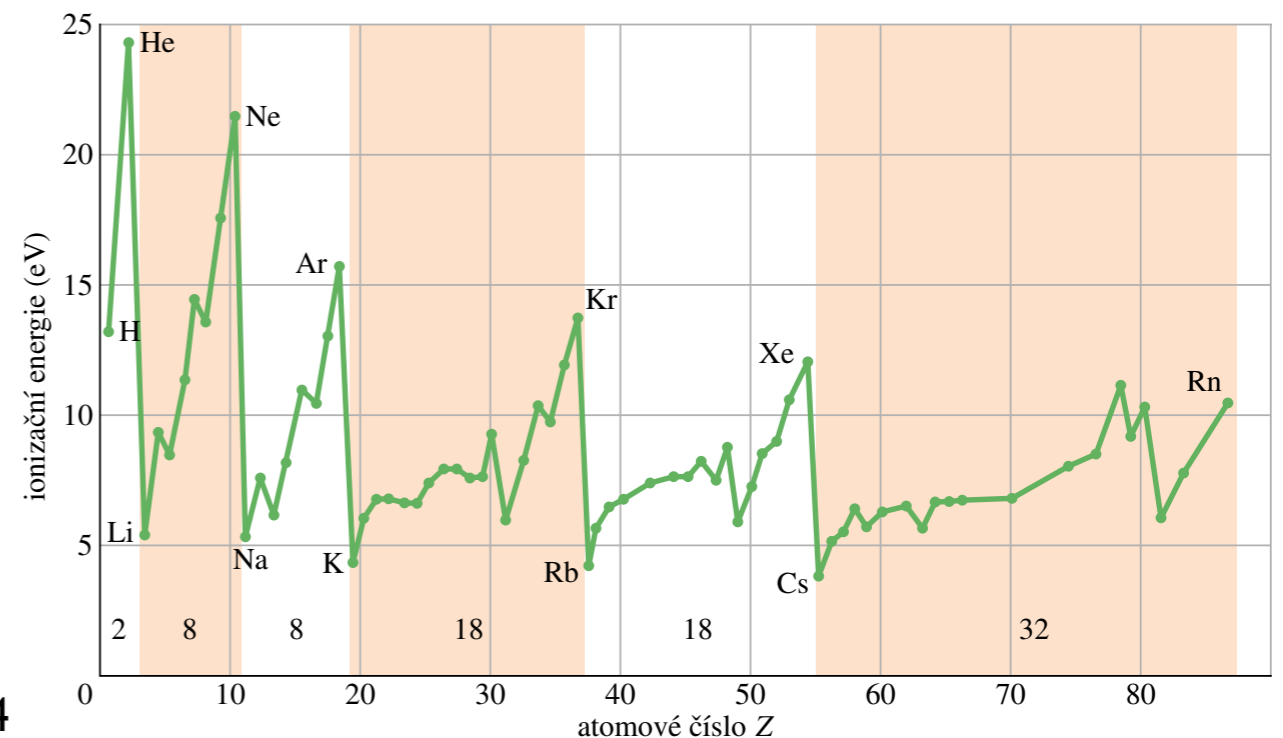
Energia elektrónu závisí aj od l , aj keď slabšie ako od n .
Stavy s rovnakým n a l majú zhruba rovnakú energiu.

Značenie stavov s rôznym momentom hybnosti

kvantové číslo l	0	1	2	3	4	5	...
moment hybnosti	0	$\sqrt{2} \hbar$	$\sqrt{6} \hbar$	$\sqrt{12} \hbar$	$\sqrt{20} \hbar$	$\sqrt{30} \hbar$...
značenie	s	p	d	f	g	h	...
pôvod	scharff	prinzipal	diffus				

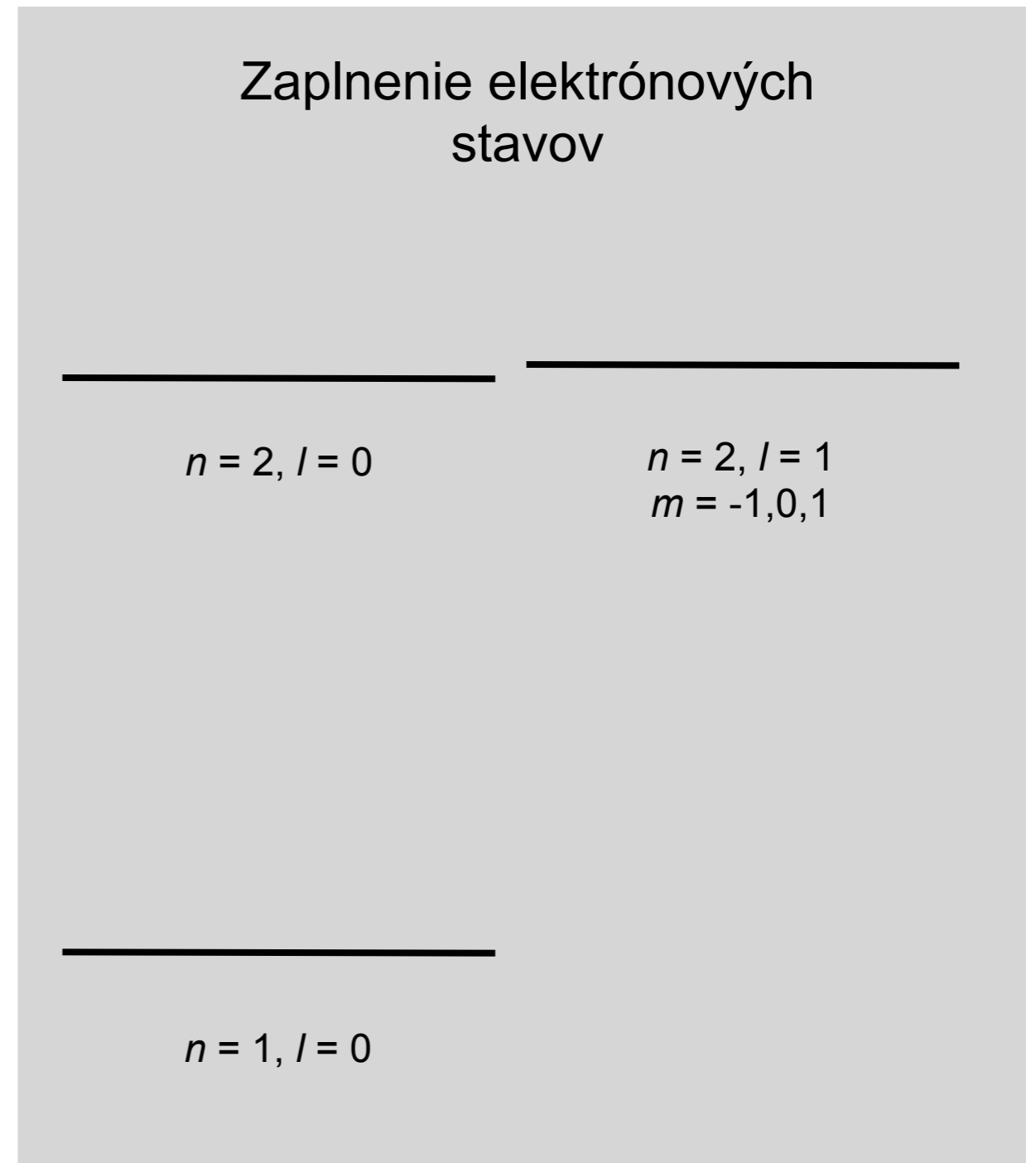
V zložitejších atónoch je stav elektrónu ovplyvnený aj interakciou s inými elektrónmi.
Musíme riešiť zložitejšiu Schrödingerovu rovnicu - numerické riešenie.

Kvantové stavy sú zapĺňané postupne
s ohľadom na Pauliho vylučovací princíp.



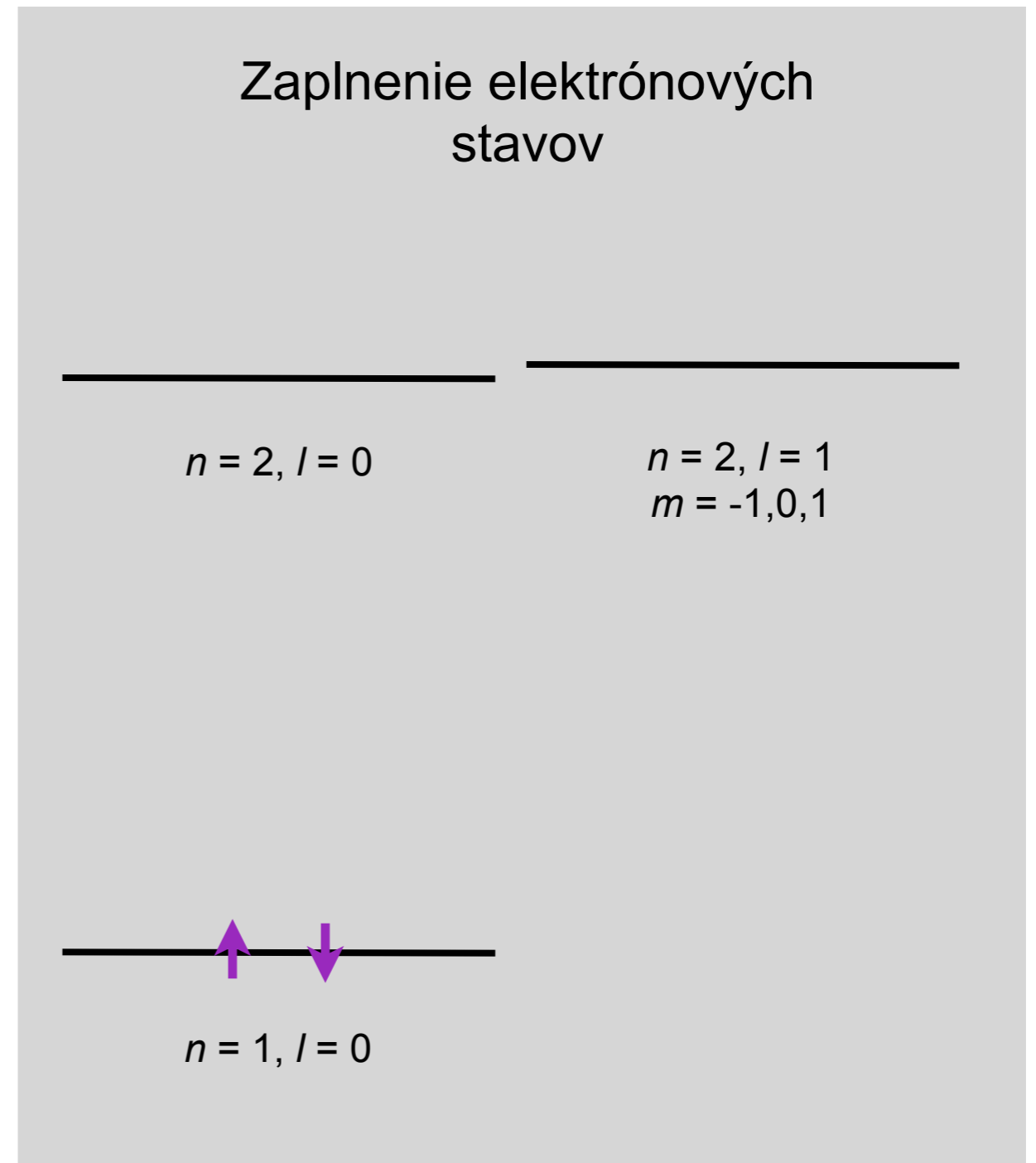
Neón

10 elektrónov



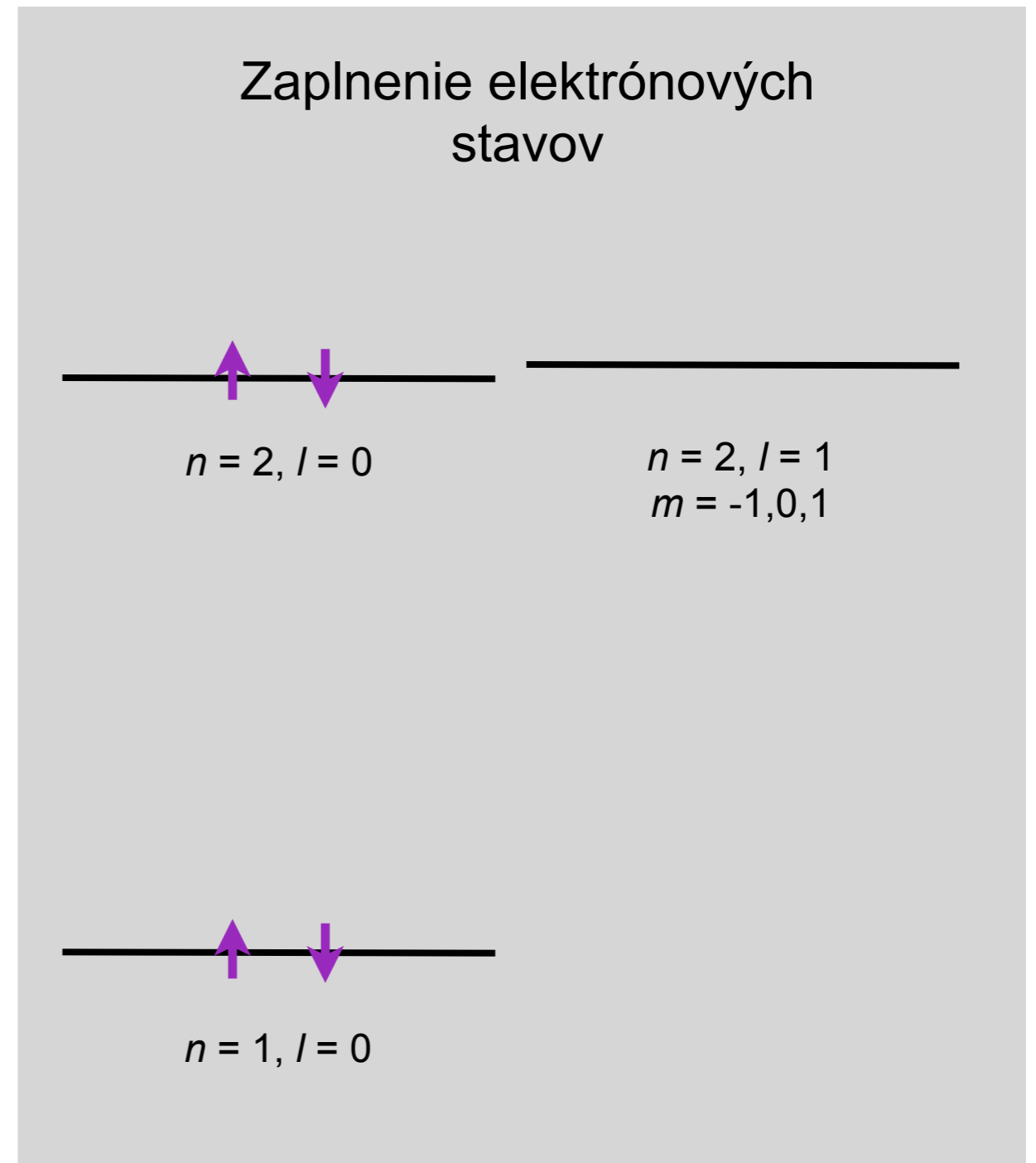
Neón

10 elektrónov



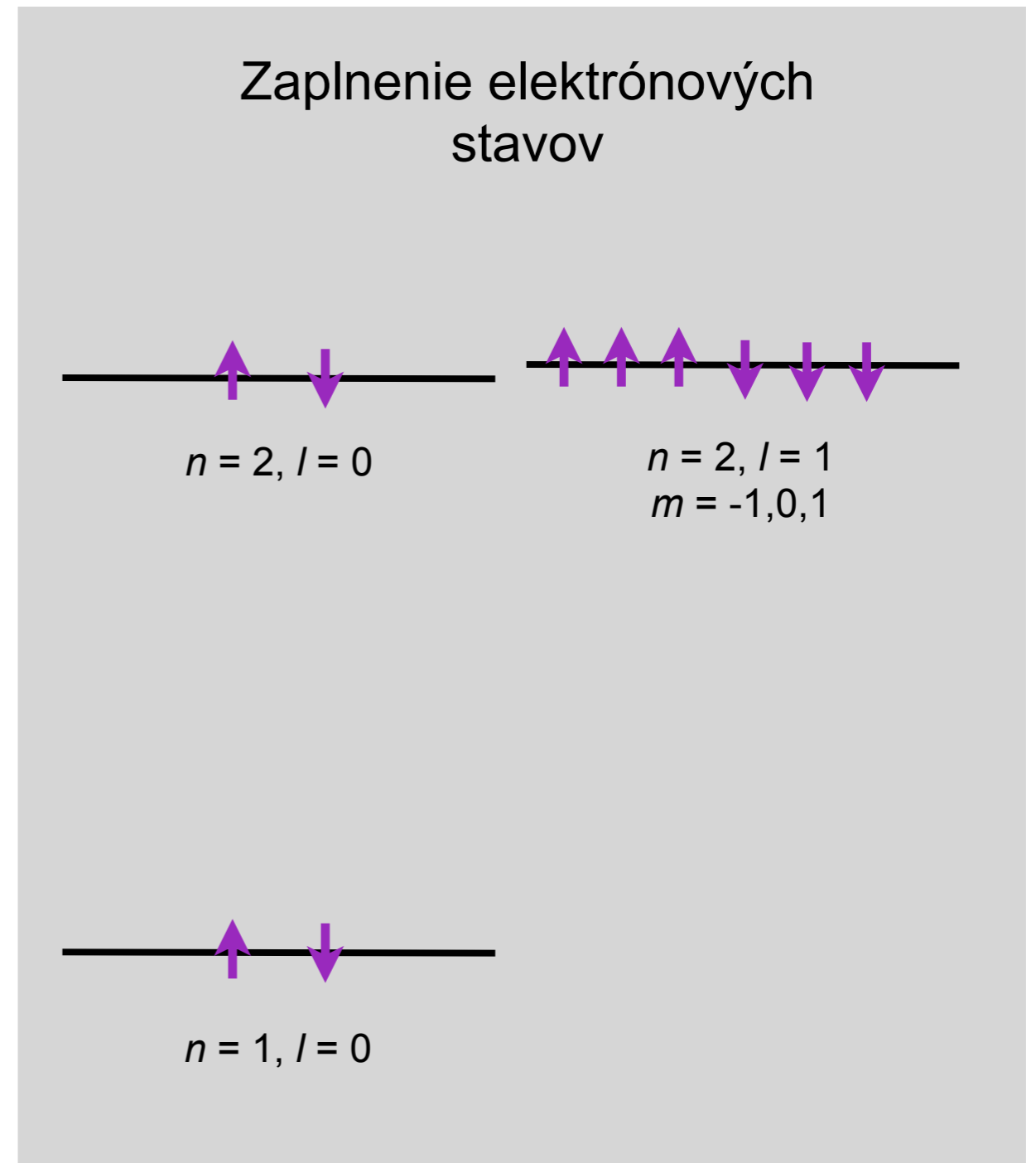
Neón

10 elektrónov



Neón

10 elektrónov



Neón

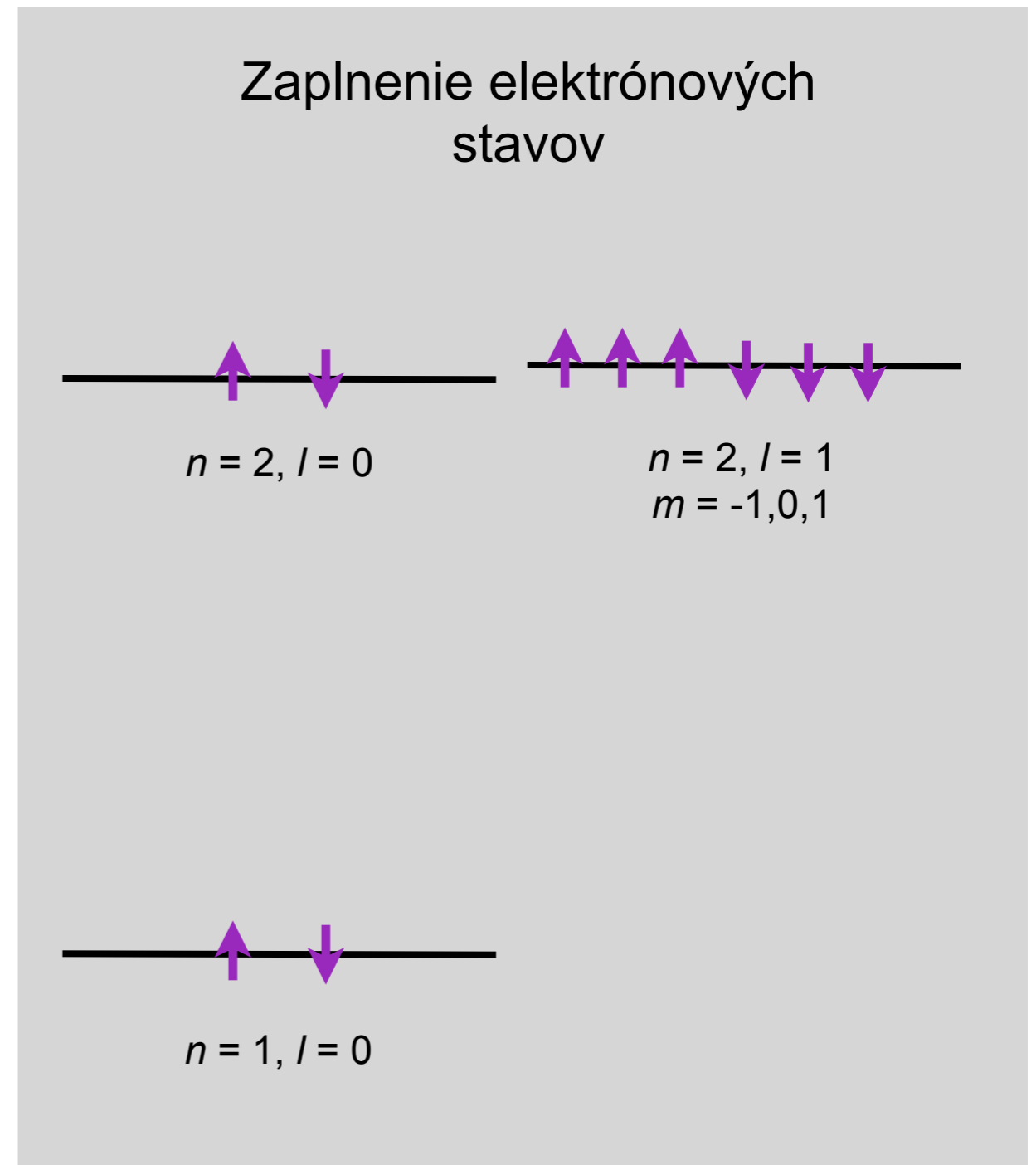
10 elektrónov

Všetky momenty hybnosti a všetky spiny sú vykompenzované

Elektrónová konfigurácia: $1s^2 2s^2 2p^6$

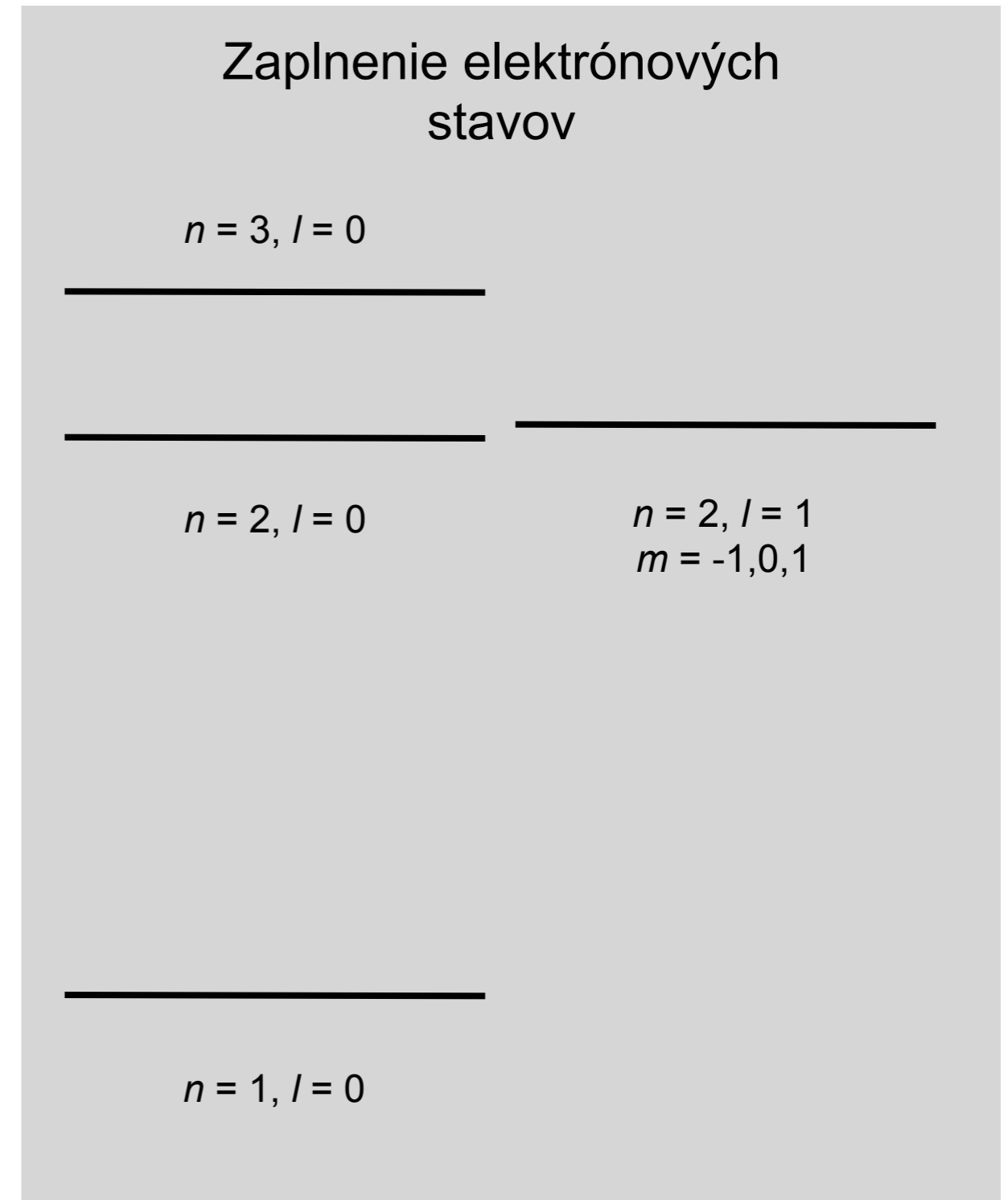
Žiadne slabo viazané elektróny:
neón chemicky nereaguje.

Toto platí pre všetky vzácne plyny
(He, Ne, Ar, Kr, Rn)



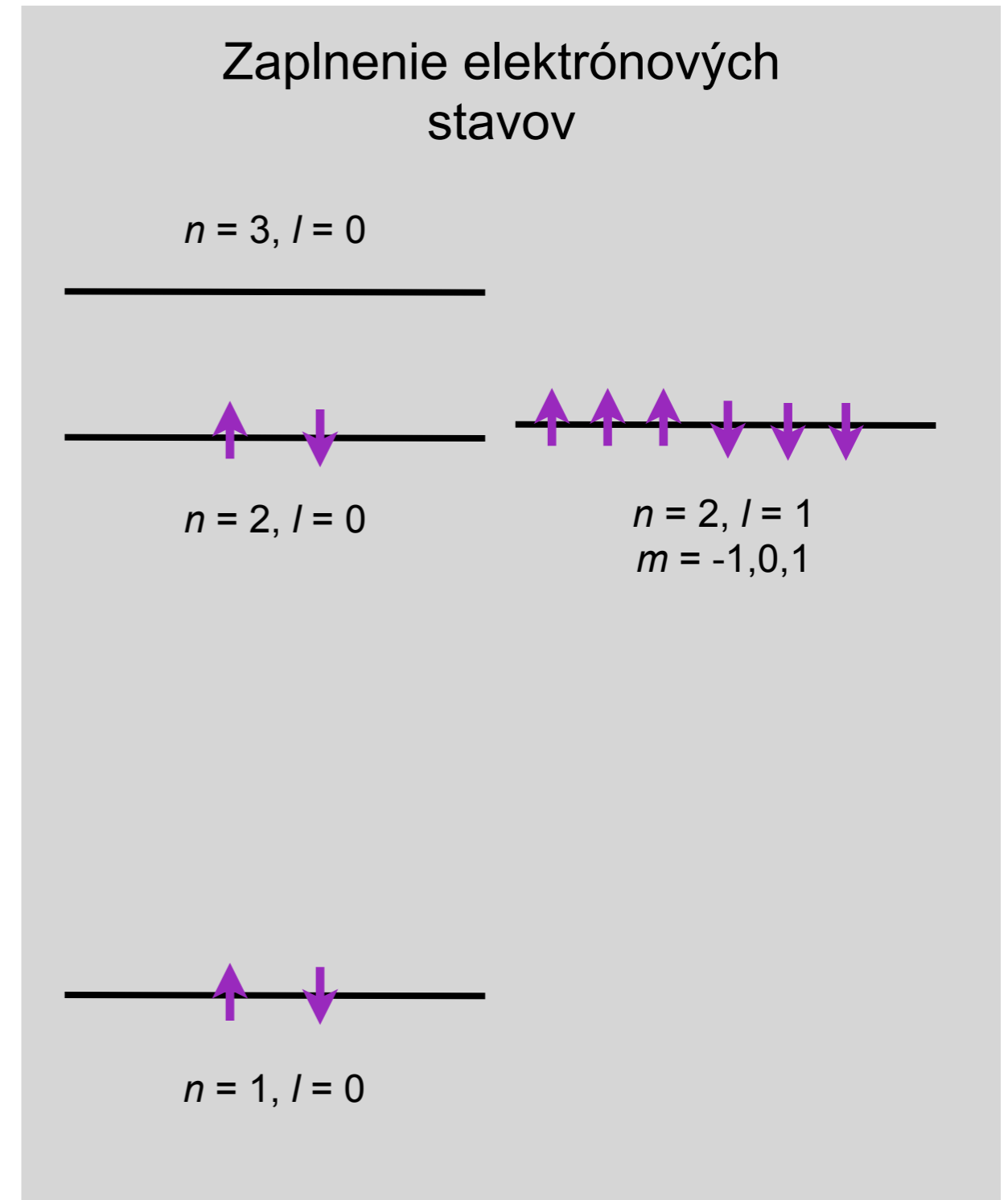
Sodík

11 elektrónov



Sodík

11 elektrónov



Sodík

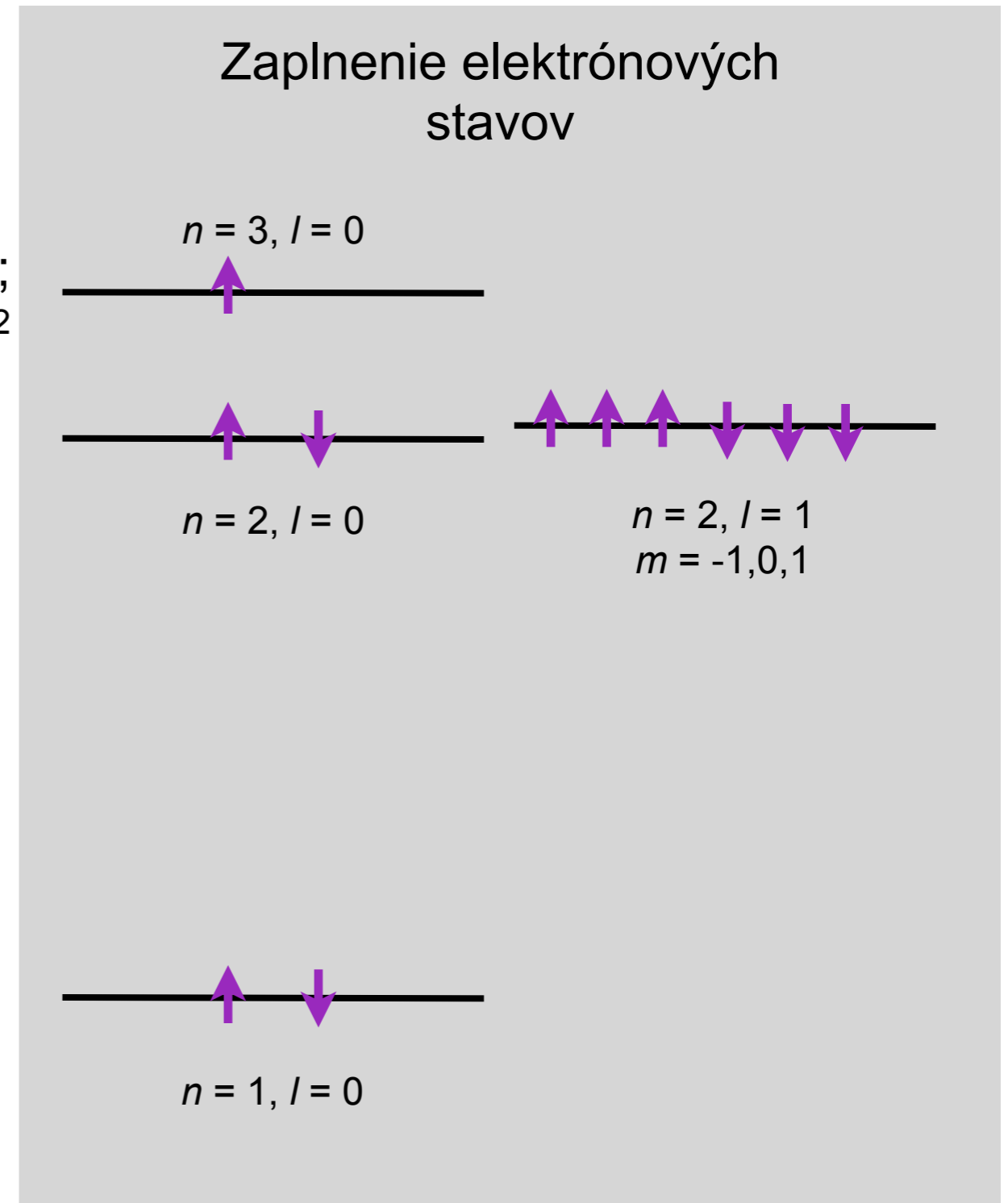
11 elektrónov

Posledný elektrón v stave 3s je viazaný slabo;
Bohrov polomer dráhy rastie s n^2

Elektrónová konfigurácia: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

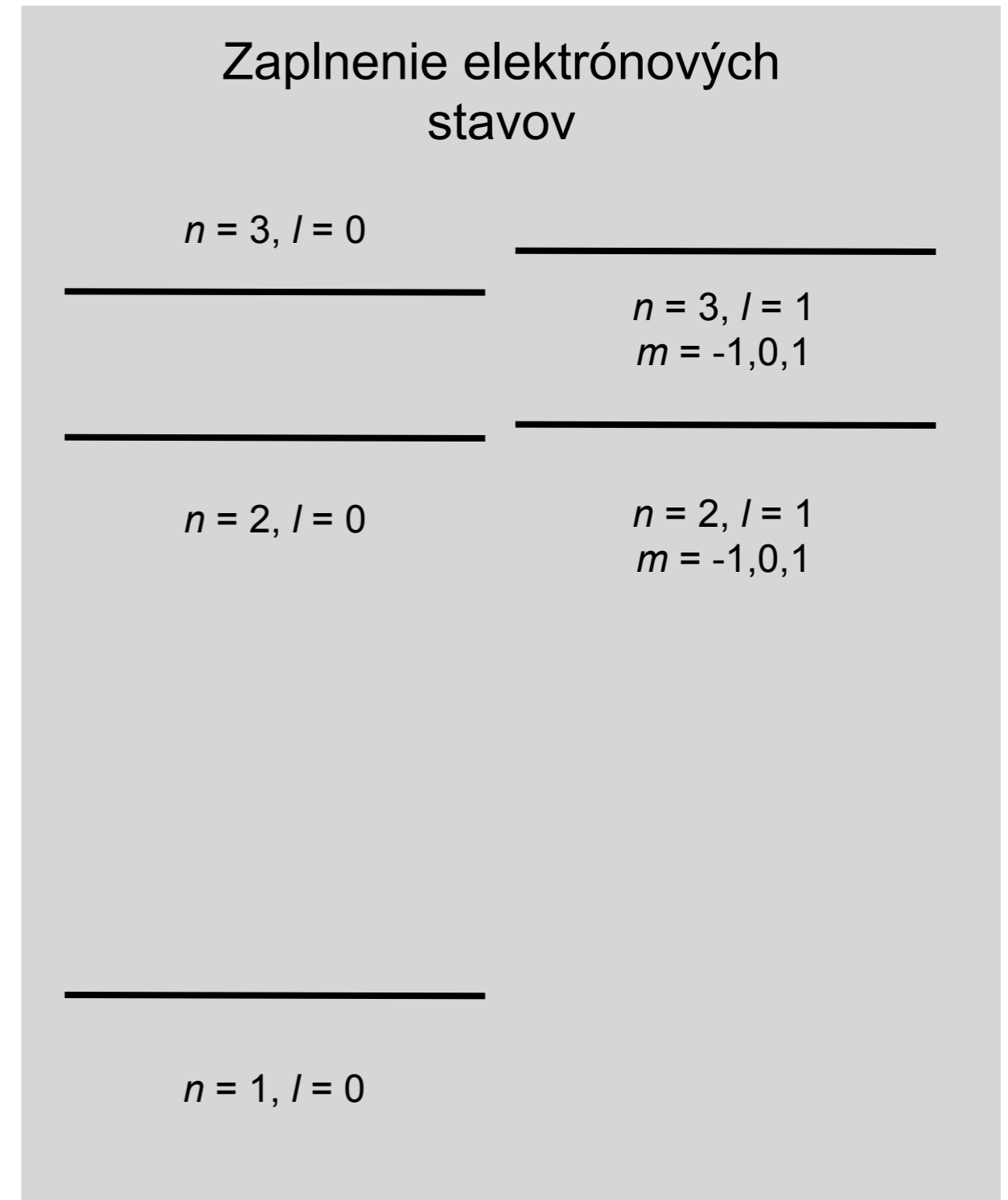
Veľmi reaktívny prvok

Tento argument platí pre všetky alkalické kovy
(Li, Na, K, Rb, Cs, Fr)



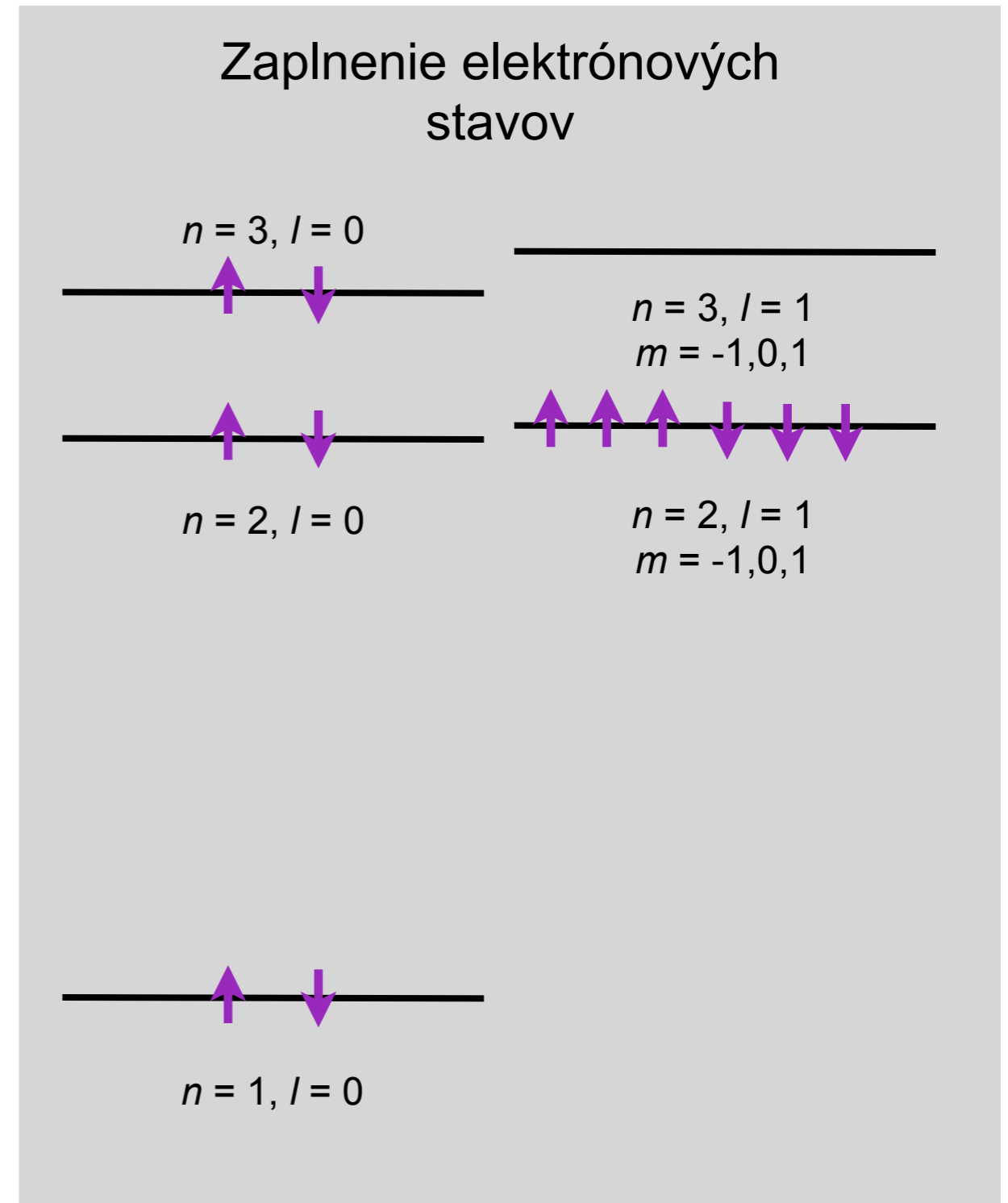
Chlór

17 elektrónov



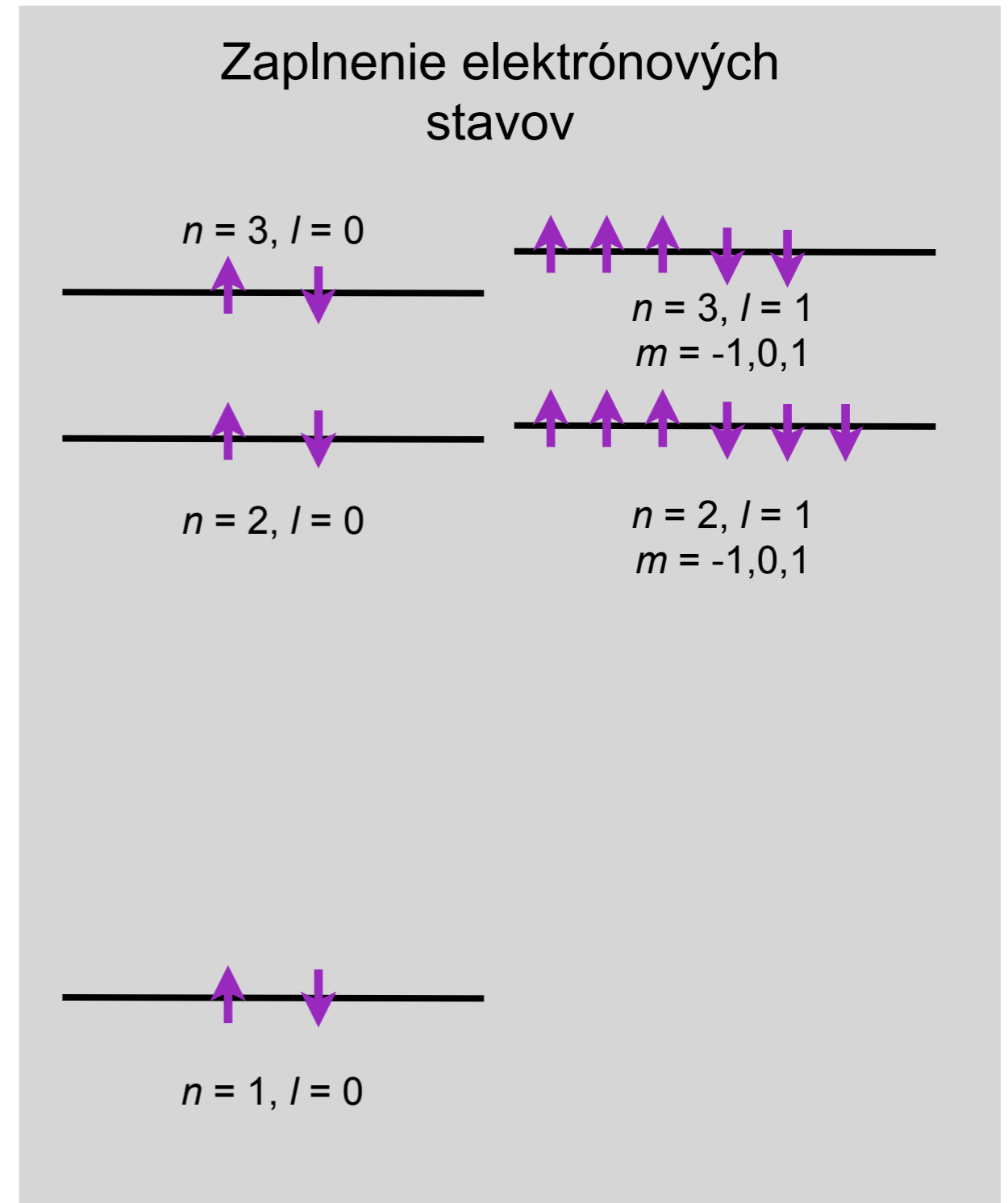
Chlór

17 elektrónov



Chlór

17 elektrónov



Chlór

17 elektrónov

Na hladine $n = 3, l = 1$ chýba jeden elektrón, aby bola úplne zaplnená,

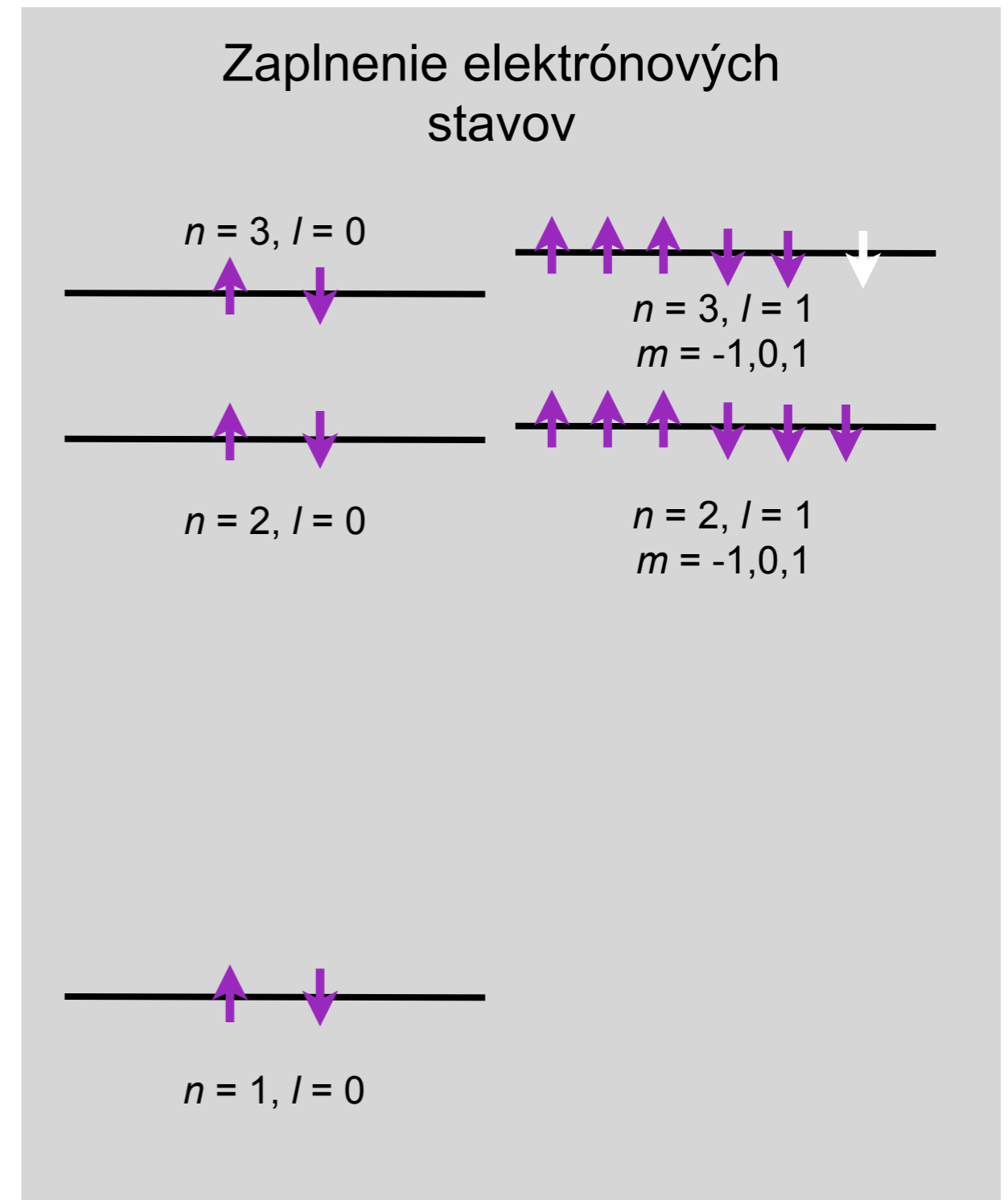
Elektrónová konfigurácia:
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Reaguje s atómami, ktoré môžu poskytnúť jeden elektrón (napr. NaCl)

Halogenidy:

(F, Cl, Br, I, At)

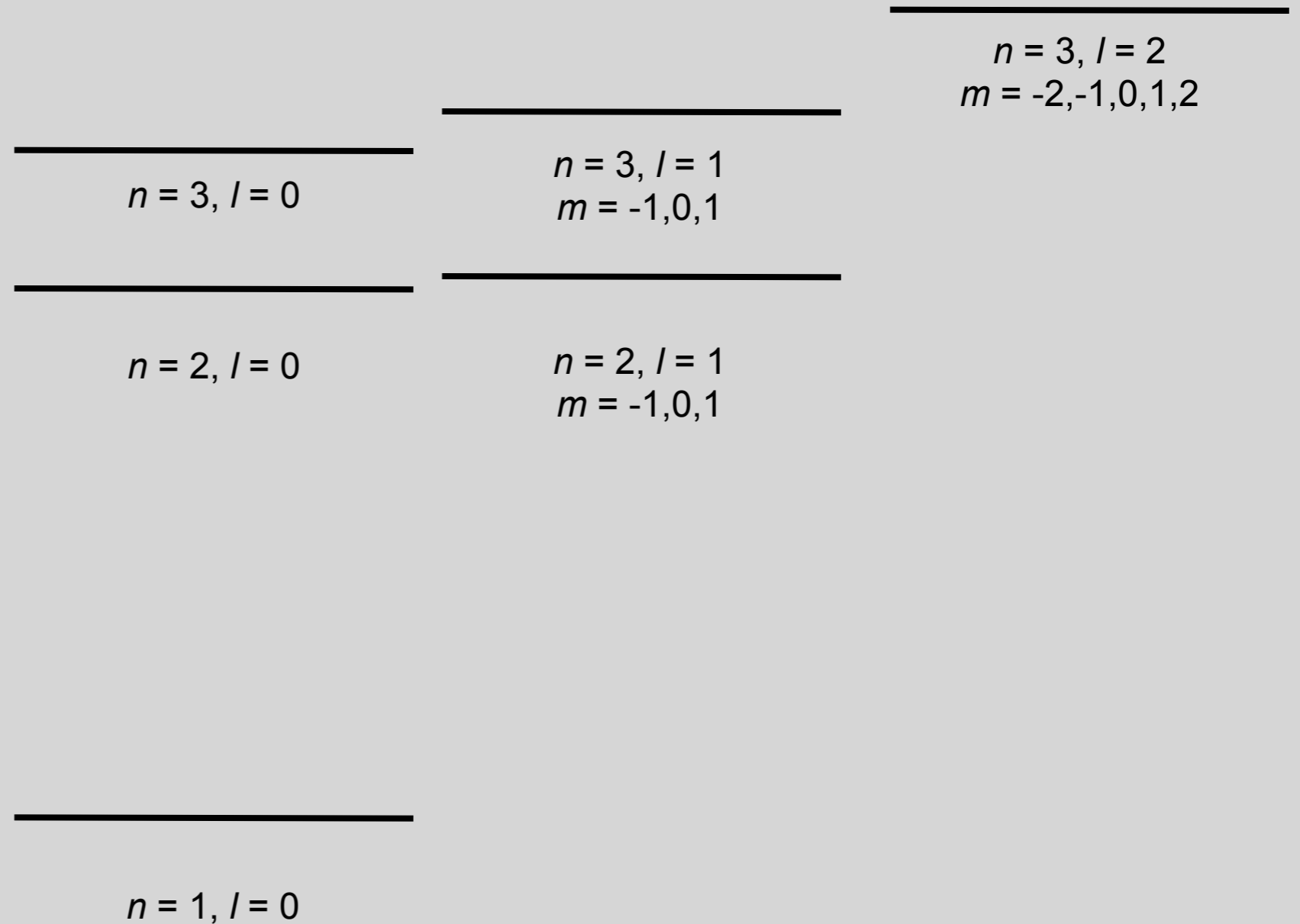
majú skoro zaplnenú hladinu $l = 1$



Draslík

19 elektrónov
(hneď pred ním je ${}_{18}\text{Ar}$)

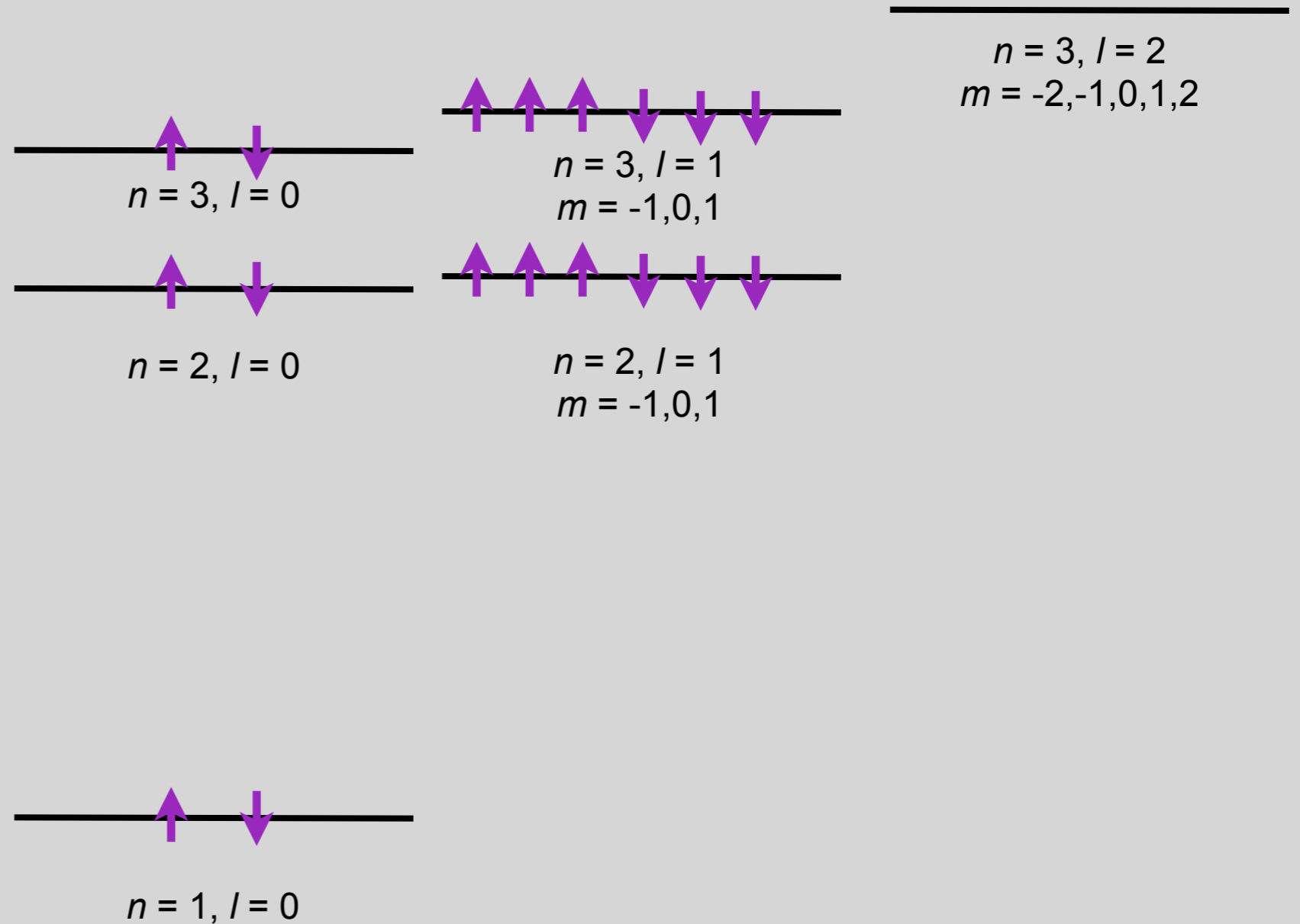
Zaplnenie elektrónových stavov



Draslík

19 elektrónov
(hneď pred ním je $_{18}\text{Ar}$)

Zaplnenie elektrónových stavov



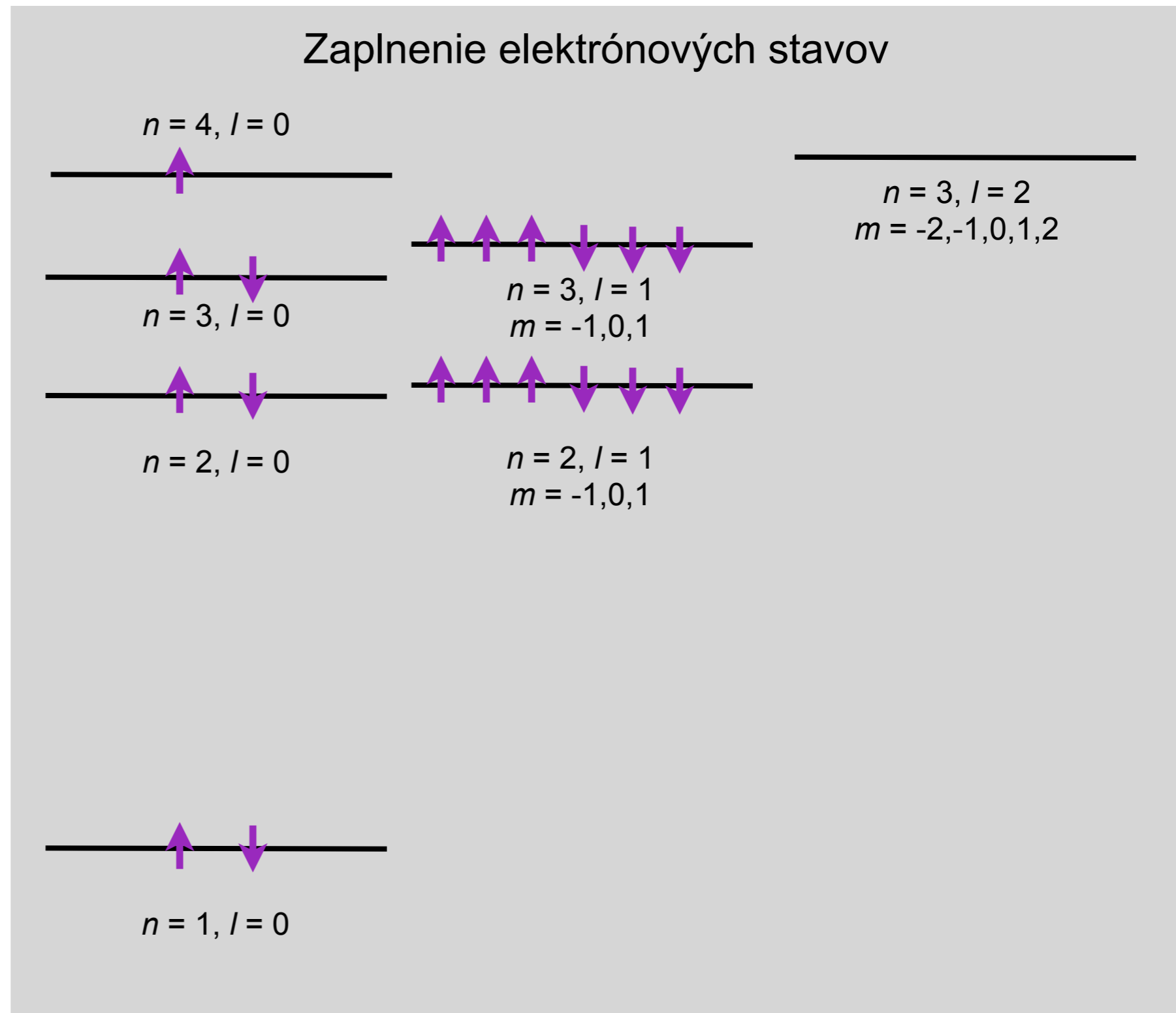
Draslík

19 elektrónov
(hneď pred ním je $_{18}\text{Ar}$)

Kvôli interakciám medzi elektrónmi je hladina 4s energeticky nižšie ako 3d

Elektrónová konfigurácia:
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
 $= [\text{Ar}] 4s^1$

Nasledujúci prvok je $_{20}\text{Ca}$:
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
 $= [\text{Ar}] 4s^2$



Postupné zapíňanie hladín

$1s^2$

$2s^2$

$2p^6$

$3s^2$

$3p^6$

$3d^{10}$

$4s^2$

$4p^6$

$4d^{10}$

$4f^{14}$

$5s^2$

$5p^6$

$5d^{10}$

$5f^{14}$

$6s^2$

$6p^6$

$6d^{10}$

$6f^{14}$

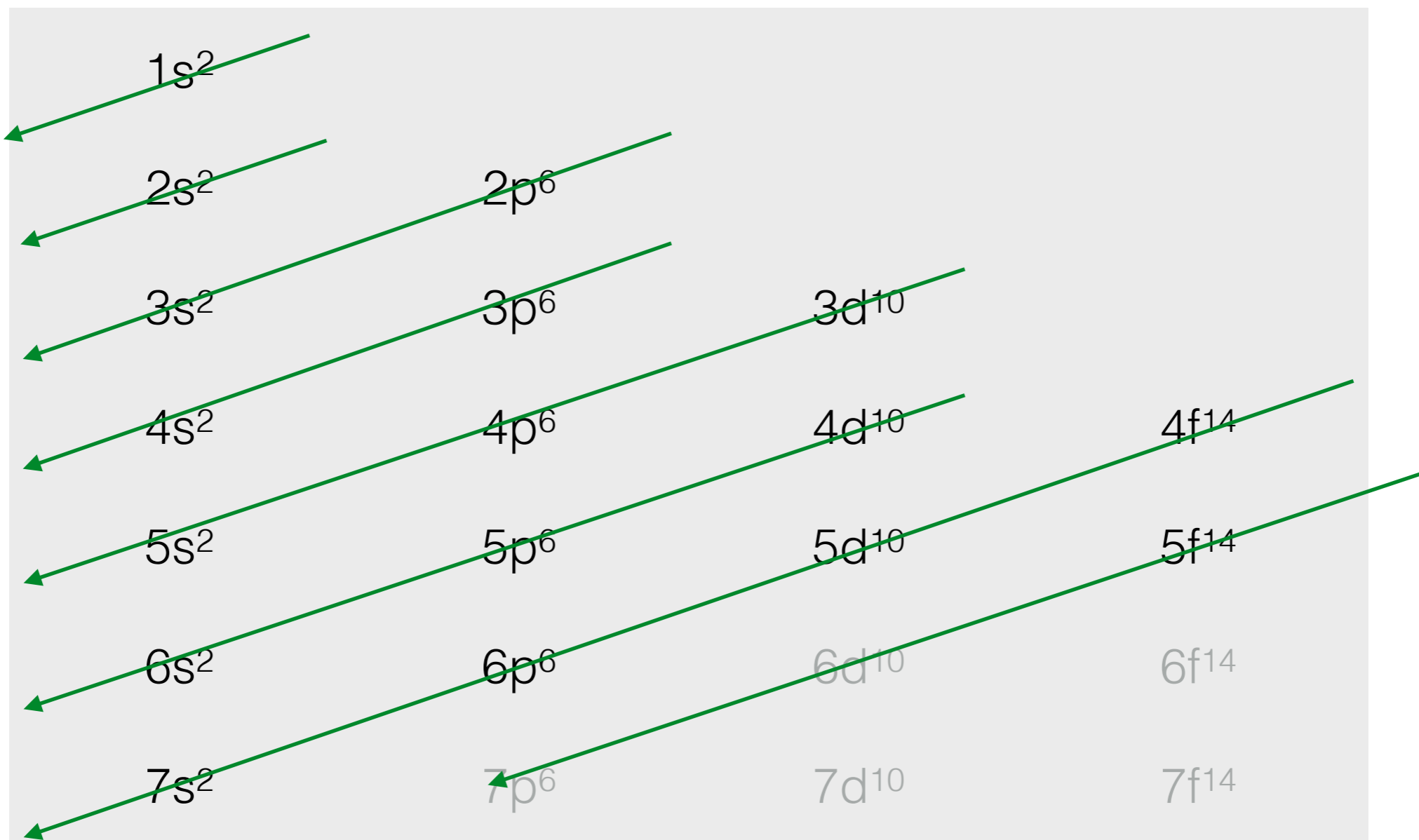
$7s^2$

$7p^6$

$7d^{10}$

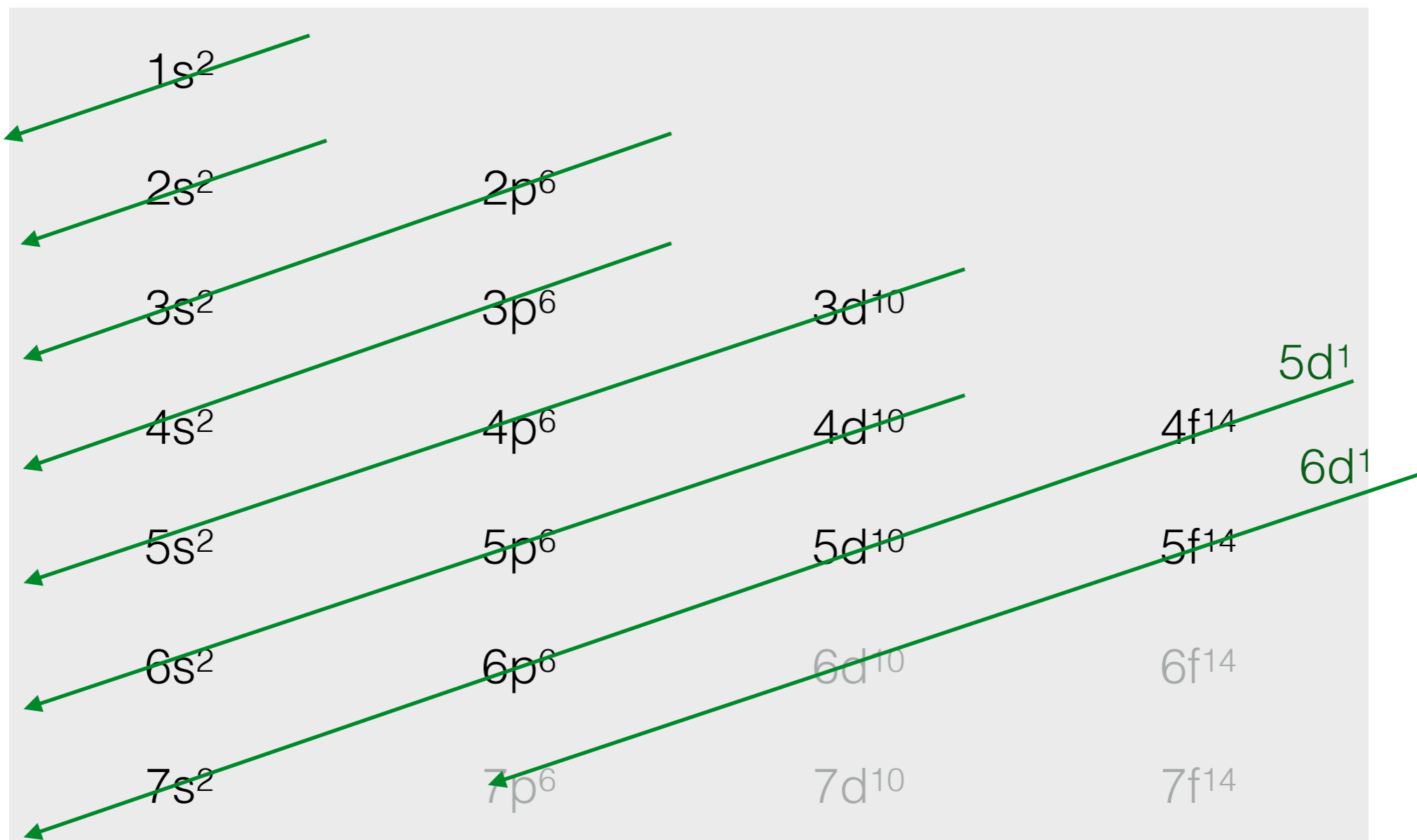
$7f^{14}$

Postupné zapíňanie hladín



Elektrónové hladiny sa zapíňajú postupne, tak ako ukazujú šípky.

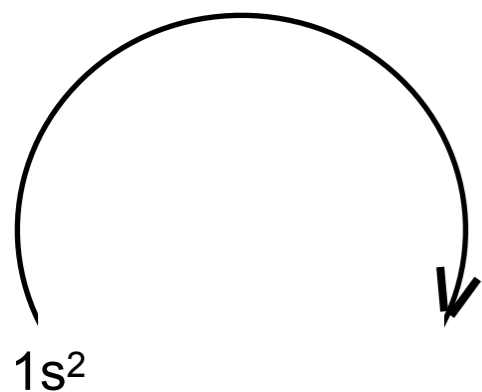
Postupné zapíňanie hladín



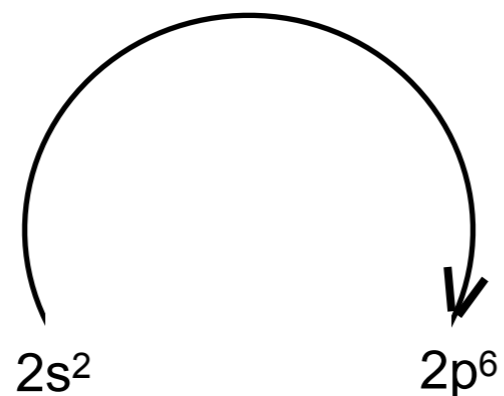
Elektrónové hladiny sa zapíňajú postupne, tak ako ukazujú šípky.

Postupné zapíňanie hladín 2

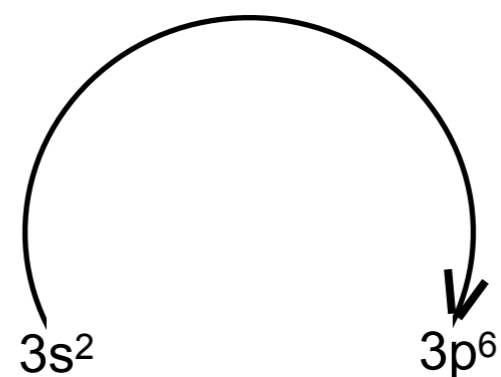
I. perióda



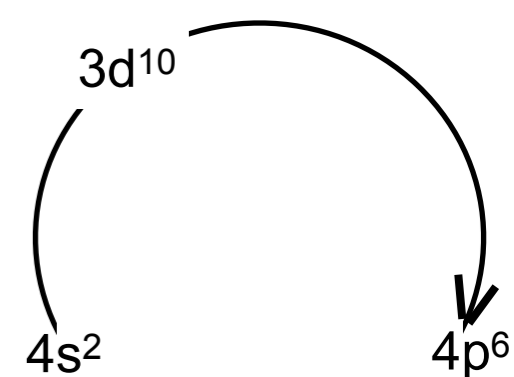
II. perióda



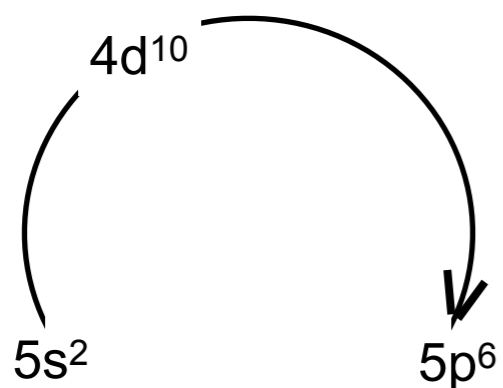
III. perióda



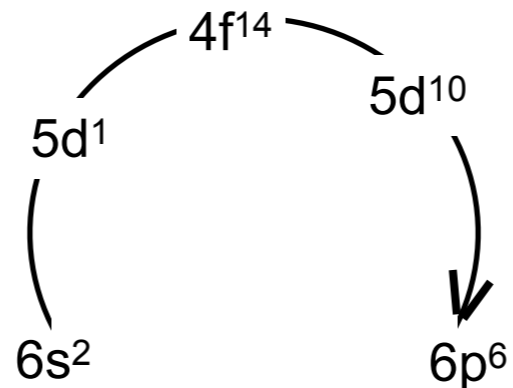
IV. perióda



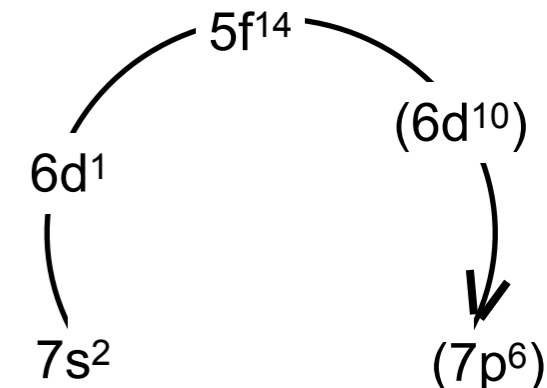
V. perióda



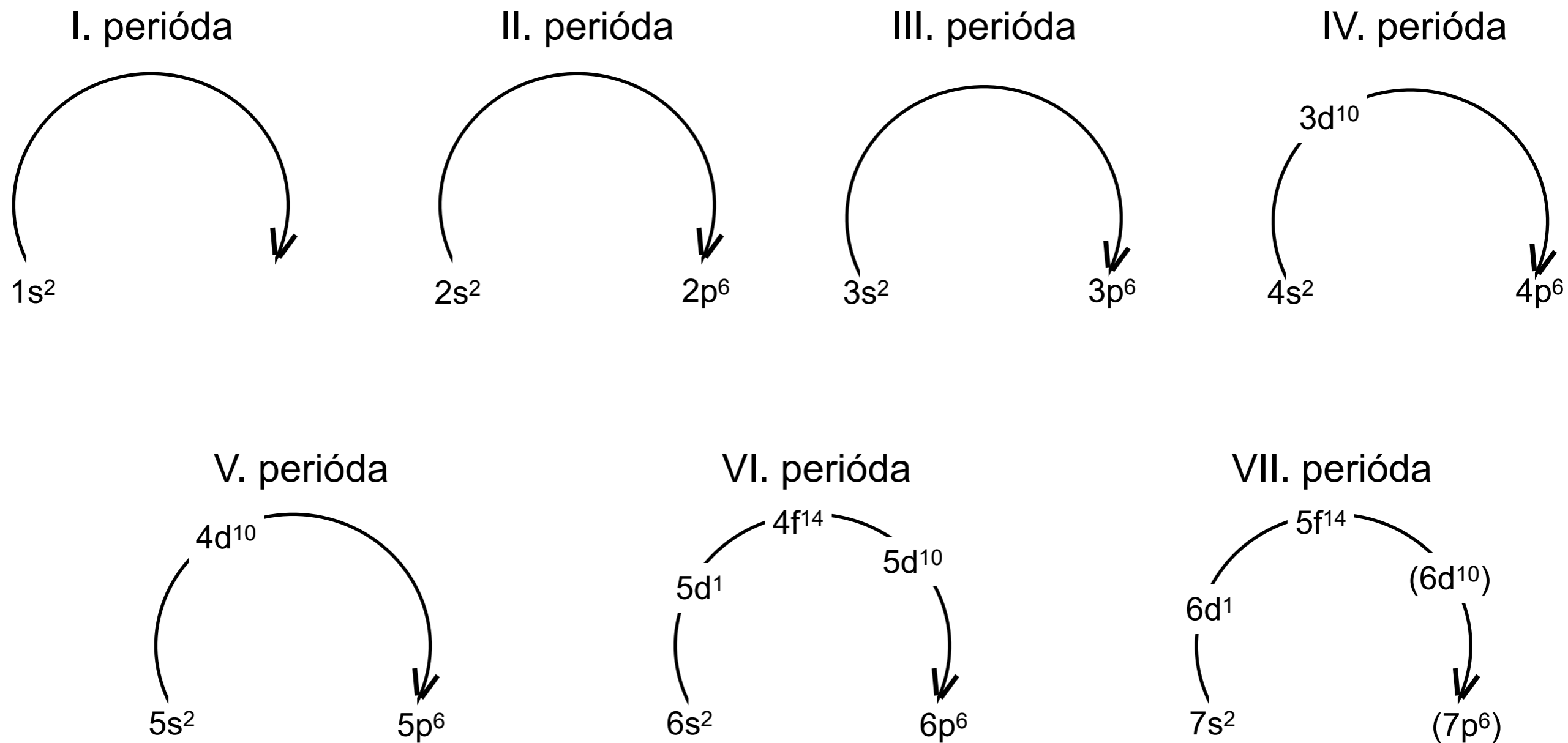
VI. perióda



VII. perióda



Postupné zapíňanie hladín 2

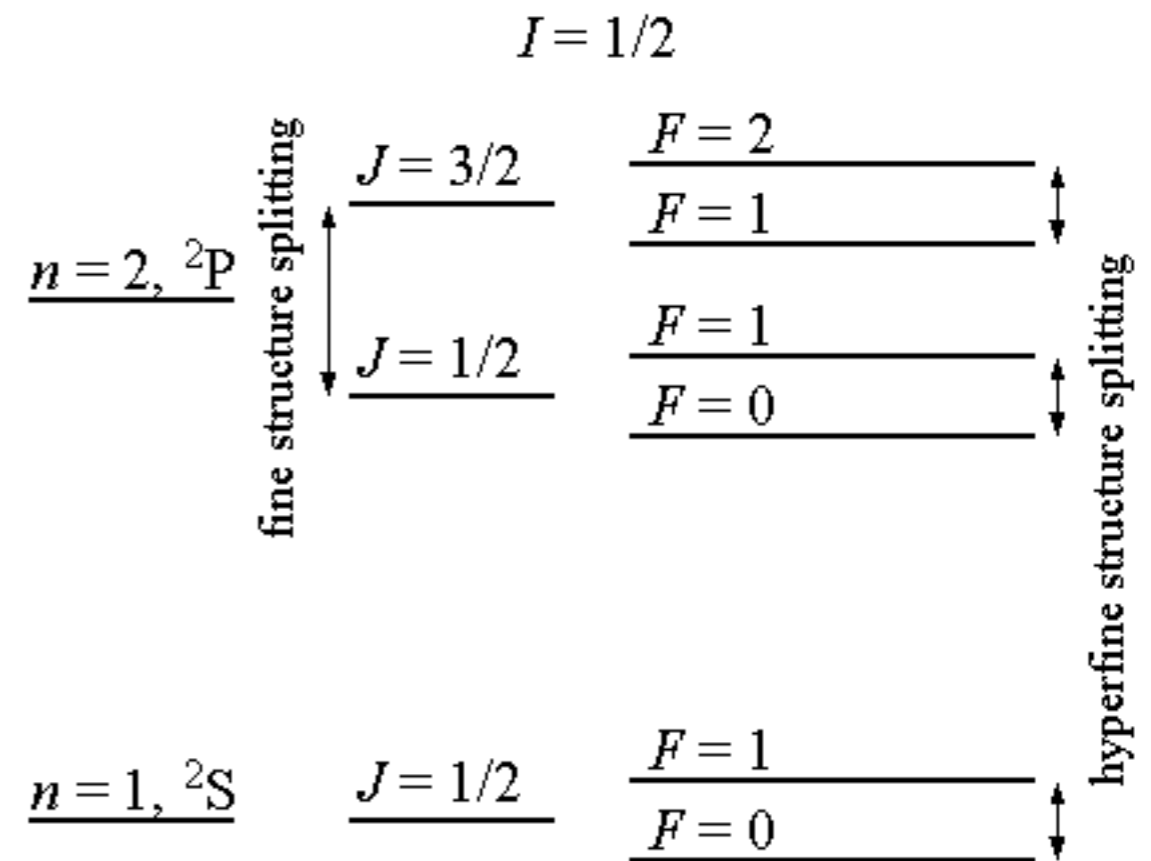


Elektrónové hladiny sa zapíňajú postupne, tak ako ukazujú šípky.

Výsledek: periodická tabuľka

Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
↓ Period																		
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57 La *	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac *	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og
				* 58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
				* 90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	

Jemná a hyperjemná štruktúra spektrálnych čiar



Jemná a hyperjemná štruktúra spektrálnych čiar

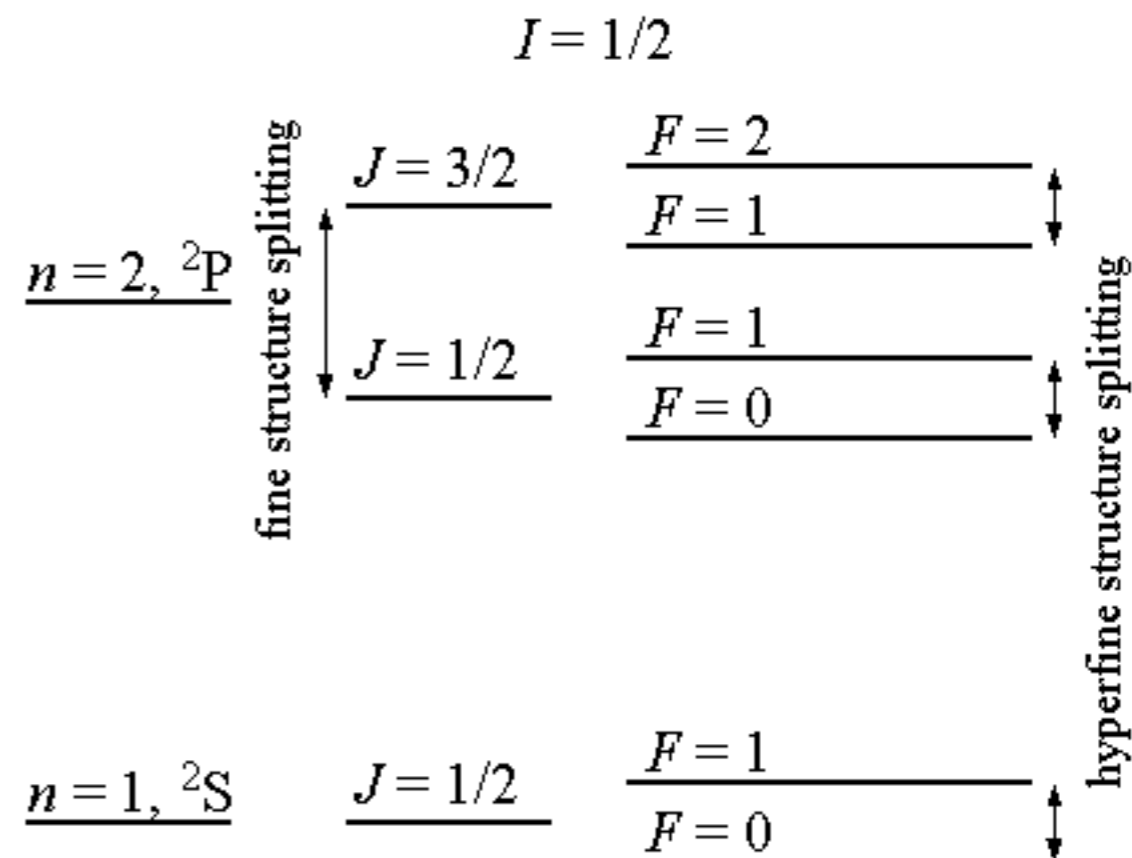
(Poznámka na okraj)

Energia na hladine danej n a l sa ešte

jemne štiepi.

Malé rozdiely v energetických hladinách sú spôsobené interakciou spinu elektrónu a jeho orbitálneho momentu hybnosti (jemná štruktúra) a celkového elektrónového momentu hybnosti so spinom jadra (hyperjemná štruktúra)

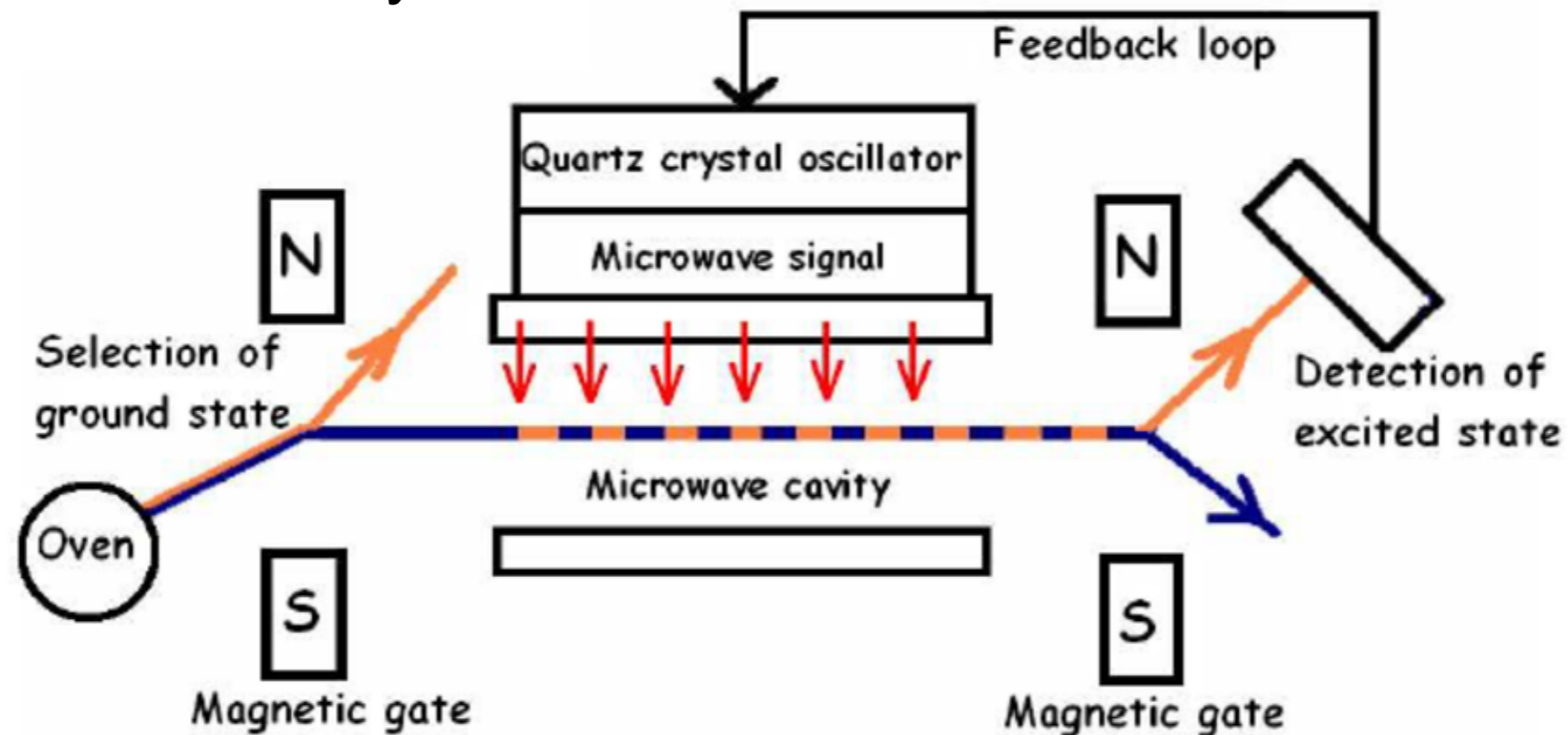
Sekunda je zavedená pomocou prechodu medzi dvoma stavmi, ktoré vzniknú hyperjemným rozštiepením základného stavu ^{133}Cs .



1 sekunda zodpovedá času 9 192 631 770 periód žiarenia emitovaného pri prechode medzi dvoma stavmi hyperjemnej štruktúry základného stavu ^{133}Cs .

Atómové hodiny

Céziové atómové hodiny:

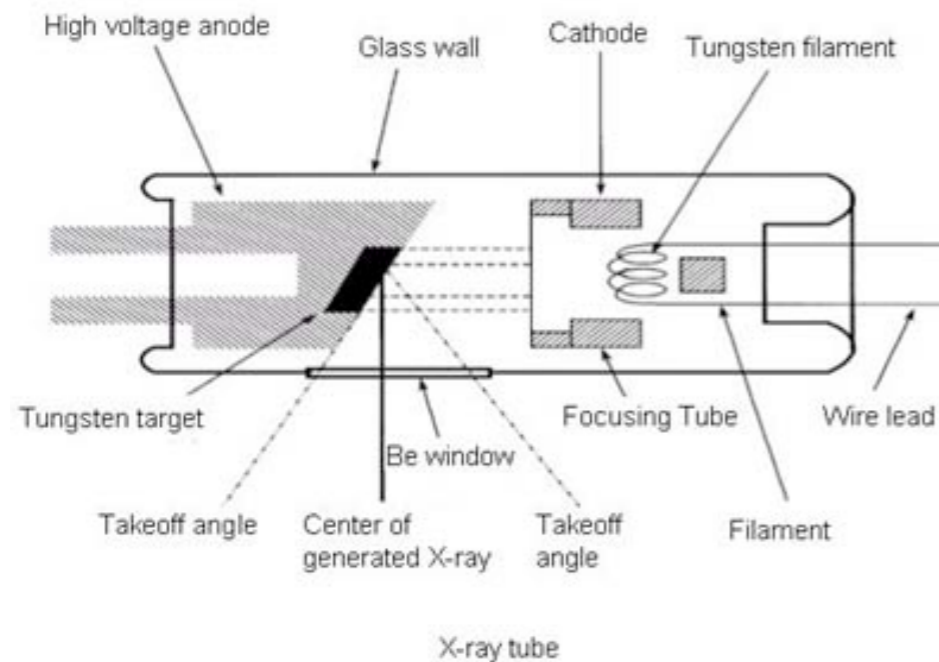


Rubídiové atómové hodiny (odlišná schéma) sú komerčne využívané, napríklad v satelitoch GPS. Potrebná je presnosť na nanosekundy.

Röntgenové spektrá

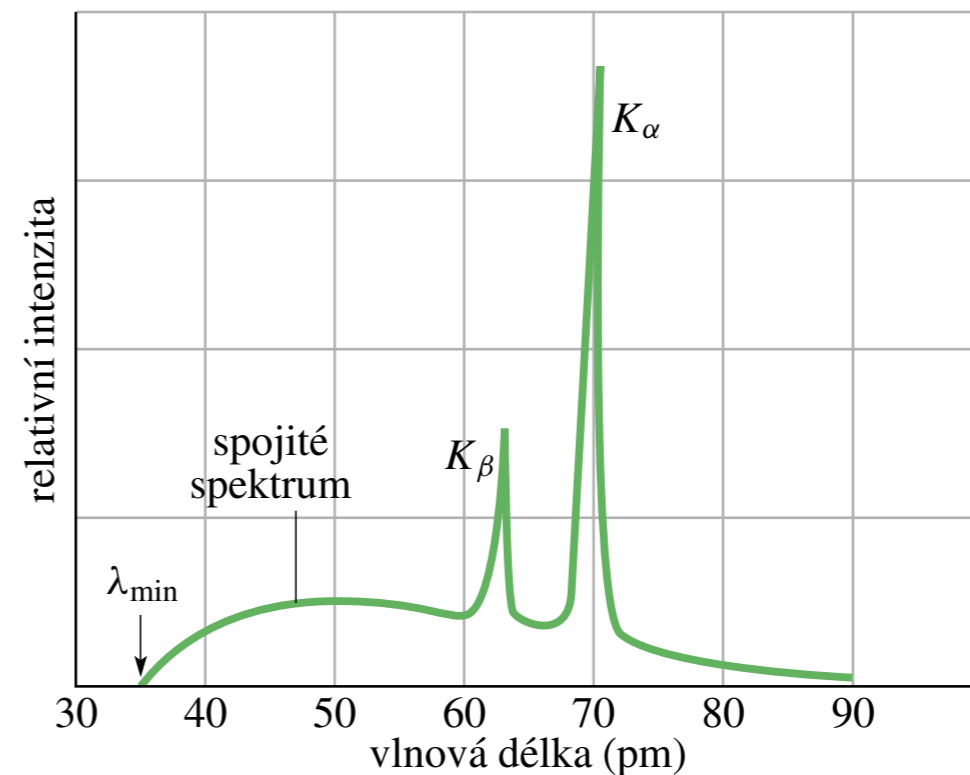
Wilhelm Conrad Röntgen (objav 8.11.1895, Nobelova cena 1901)

RTG žiarenie vzniká pri ostreľovaní látok veľmi rýchlymi elektrónmi



Dve zložky spektra:

- spojité spektrum (brzdné žiarenie)
- charakteristické spektrum



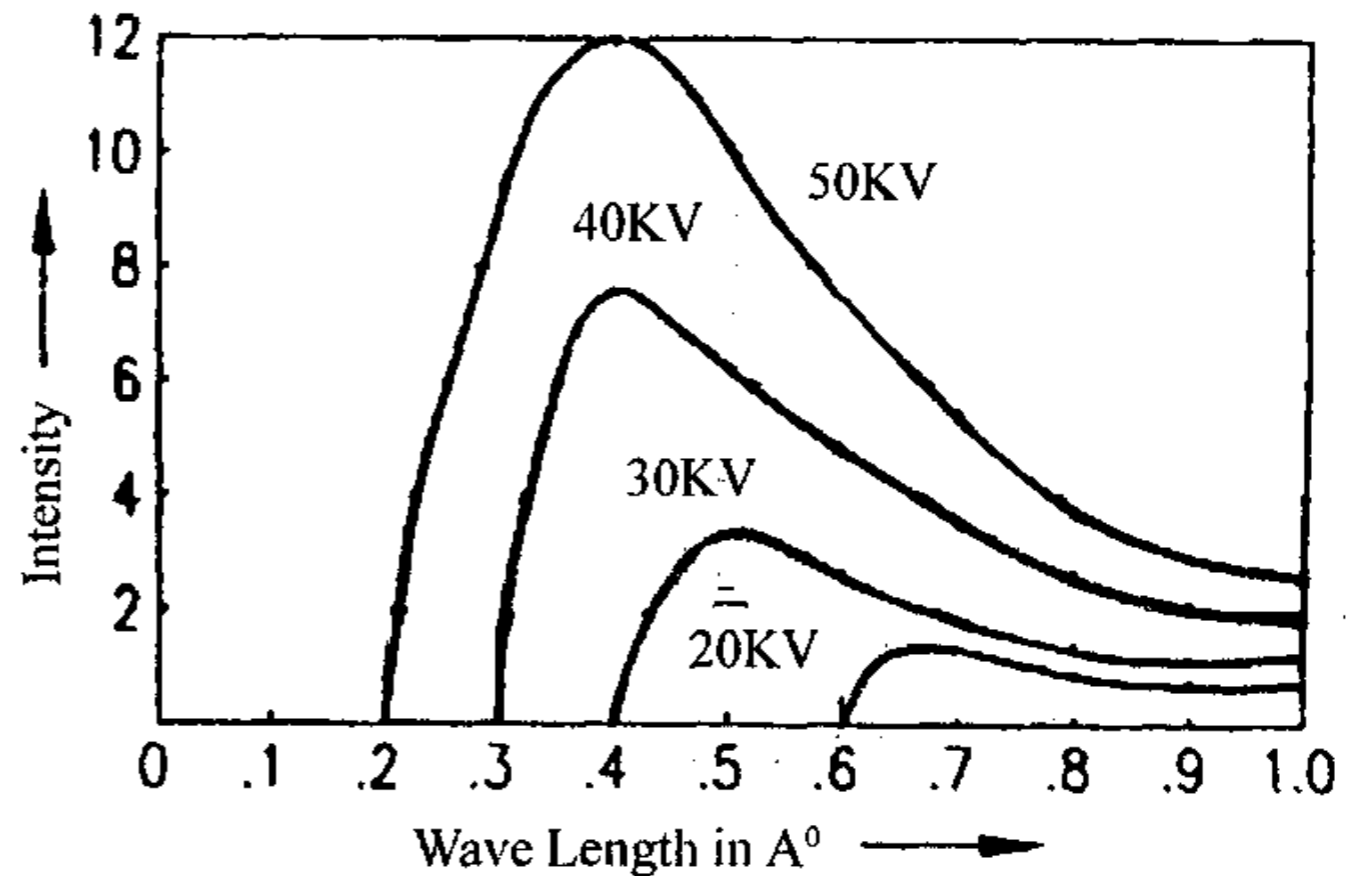
Spojité röntgenové spektrum

Vzniká ako brzdové žiarenie, pri zbrzdení elektrónu v látke.

Všetka kinetická energia elektrónu alebo len jej časť je odnesená vyžiareným fotónom. Zvyšok sa premení na teplo.

Minimálna vlnová dĺžka (maximálna energia fotónu)

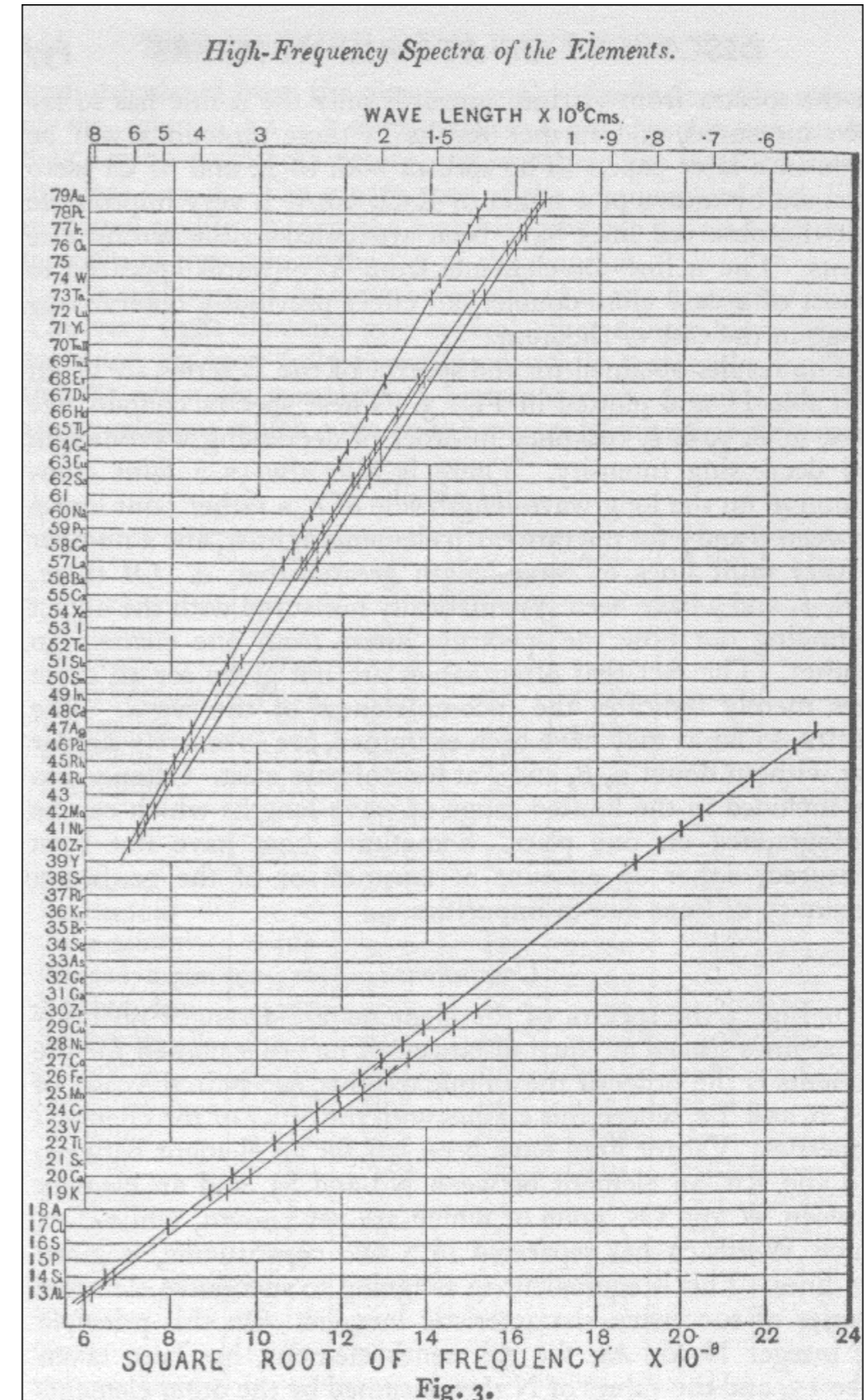
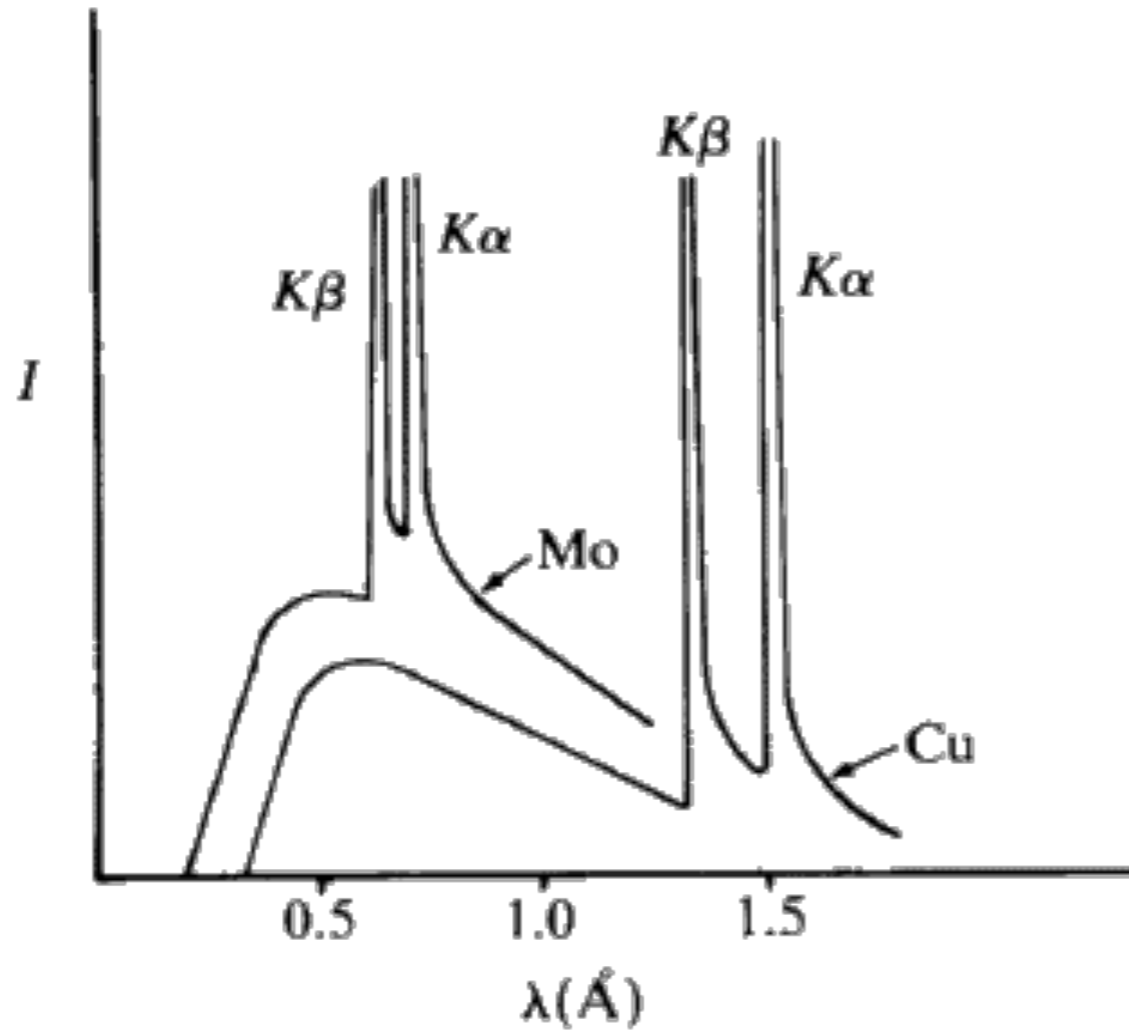
$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{eU}$$



Charakteristické röntgenové spektrum



Henry G.J. Moseley
(pozorovanie 1913, umrel 1915, 27 rokov)



Moseleyho zákon

Závislosť frekvencie žiarenia od atómového čísla Z

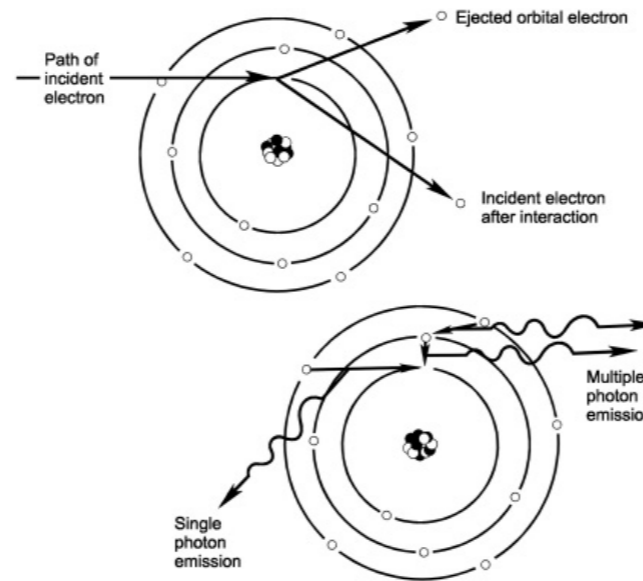
$$\sqrt{\nu} = A\sqrt{c}(Z - b)$$

Pre čiaru K_{α} :

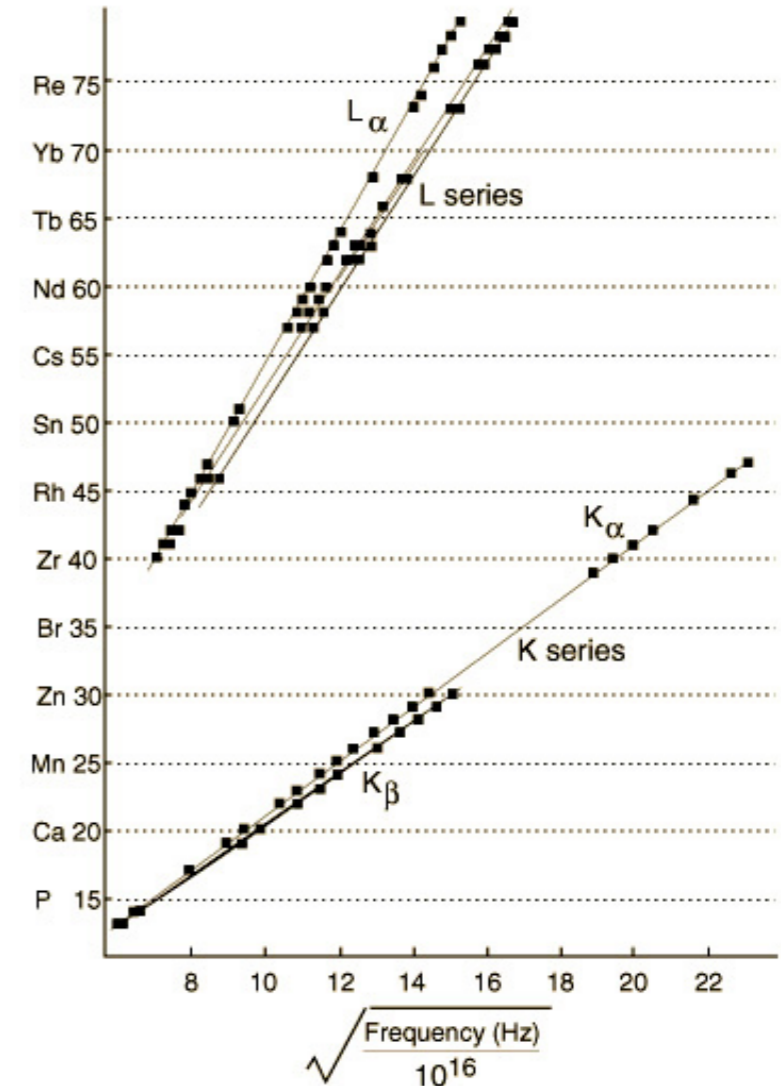
(R je Rydbergova konšt.)

$$A = \sqrt{\frac{3}{4}R} \quad b = 1$$

Vyrazený elektrón z najnižšej hladiny 1s a preskok elektrónu z vyššej hladiny na 1s



Moseley Plot of Characteristic X-Rays



Adapted from Moseley's original data (H. G. J. Moseley, Philos. Mag. (6) 27:703, 1914)

Odvodenie:

$$\nu = Rc \frac{3}{4} (Z - 1)^2 = Rc \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) (Z - 1)^2$$

Séria K zodpovedá preskokom na najnižšiu energetickú hladinu

Moseleyho zákon: dôsledky

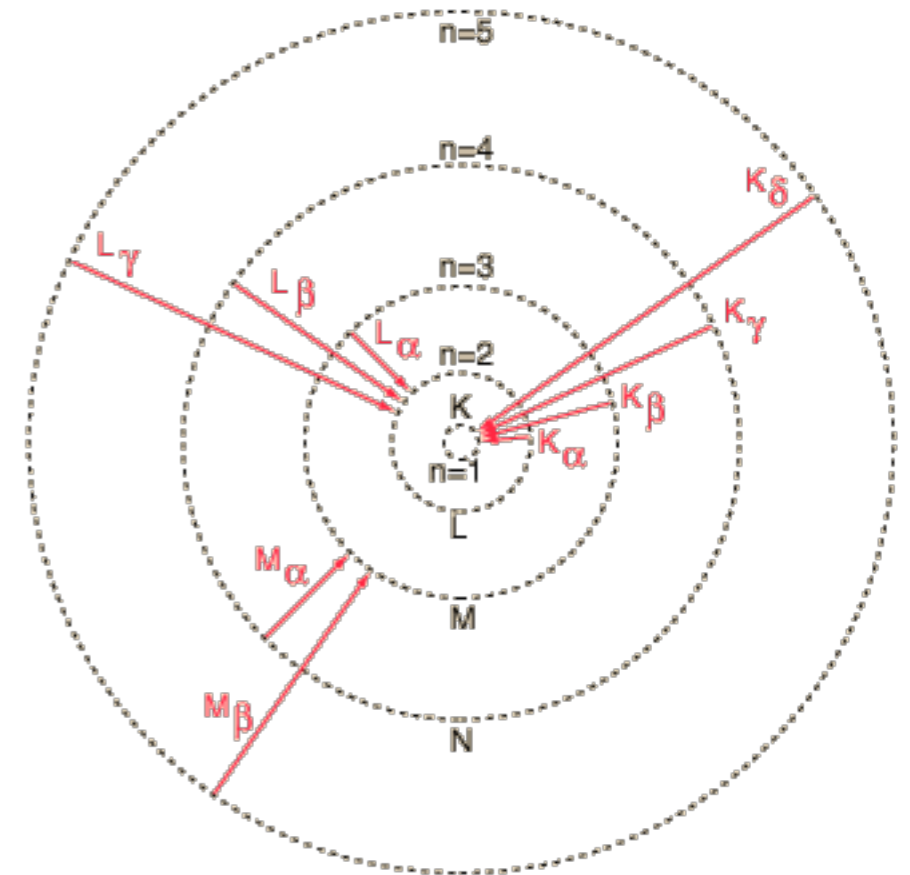
Séria L zodpovedá preskokom na druhú najnižšiu energetickú hladinu

$$\nu = Rc \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) (Z - b)^2 = Rc \frac{5}{36} (Z - b)^2$$

Pre čiaru L_α

$$A = \sqrt{\frac{5}{36}} R \quad b = 7,5$$

b parametrizuje efektívny náboj, ktorý cíti elektrón



- povolené sú len také preskoky, pri ktorých $\Delta l = \pm 1$ a $\Delta m = \pm 1, 0$
- pomocou takýchto pozorovaní mohli byť definitívne zaradené do periodickej tabuľky prvky, ktoré boli príliš podobné chemicky a aj hmotnosťami (Co-Ni, Te-I,...)

Kvalitatívne koncepty chemickej väzby

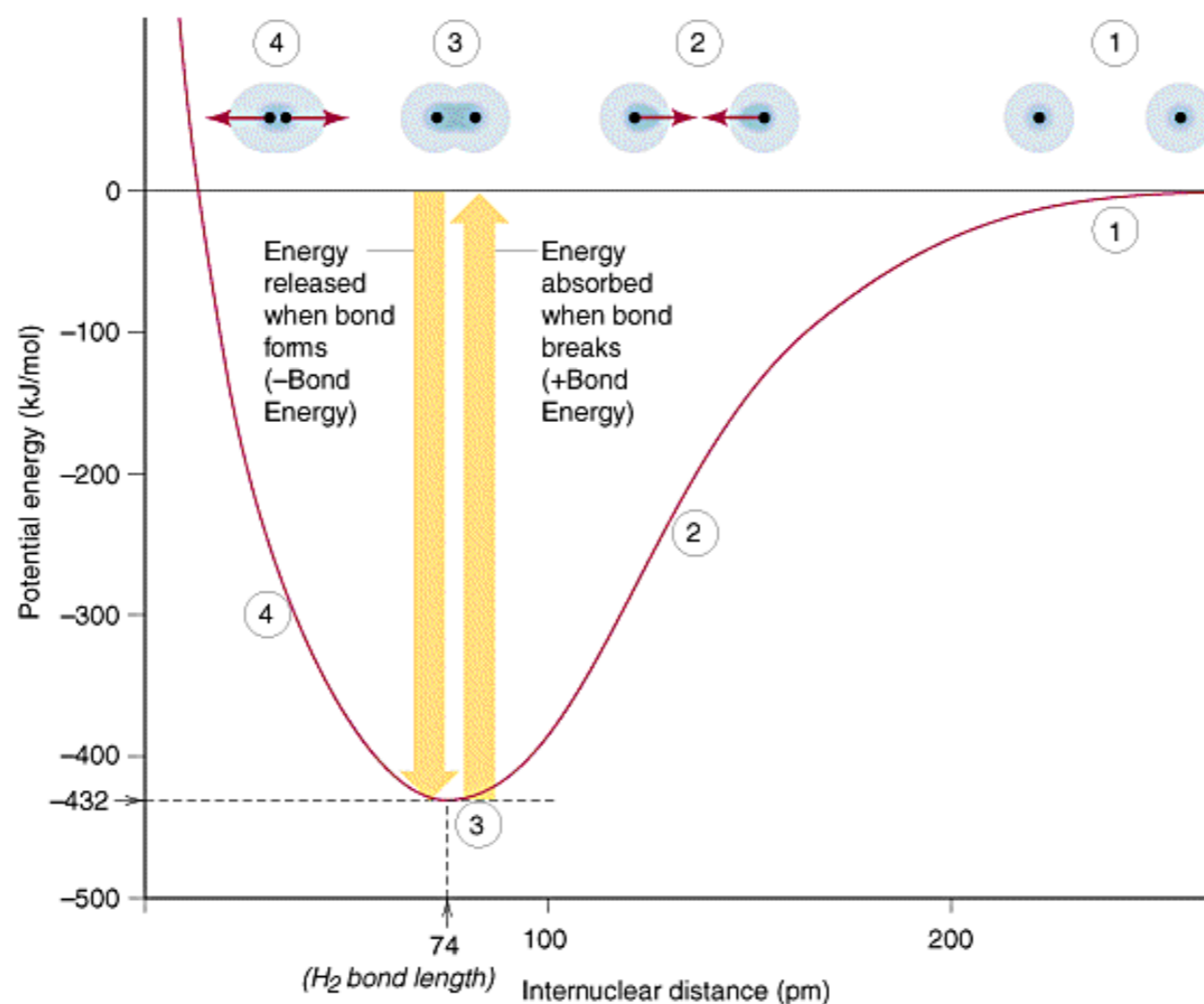
Kovaletná väzba: prekryv orbitalov valenčných elektrónov

Pôsoiace sily:

- Elektrické odpudzovanie medzi jadrami
- Elektrické odpudzovanie medzi elektrónmi
- Elektrické priťahovanie medzi elektrónmi a jadrami

Chemická väzba vzniká, ak priťahovanie prevládne
(Elektróny sú medzi jadrami)

Závislosť energie od vzdialenosti medzi jadrami



- Minimálna energia závislosti: väzbová disociačná energia D_e
- Minimum potenciálu: molekula môže kmitať okolo nulového bodu
- Kvantovaný LHO: energia nulových kmitov E_{vib} !!
- Energia potrebná na oddialenie atómov $D_0 := D_e - E_{vib}$
- ⇒ **Korigovaná väzbová disociačná energia**

Vibračný pohyb jadier

Potenciál v okolí minima môže byť aproximovaný parabolou
⇒ potenciál lineárneho harmonického oscilátora (LHO)

$$U(x) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Používa sa redukovaná hmotnosť, pretože kmitá systém dvoch atómov. Atómy kmitajú proti sebe.

Vlastná frekvencia je merateľná z pozorovaného spektra. Typicky patrí do IČ oblasti.

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

Môžeme určiť silovú konštantu k !

Energia nulových kmitov: $E_{vib} = \frac{\hbar \omega}{2}$

Polárna a iónová väzba

Molekula z rôznych atómov - presun väzbových elektrónov k atómu s vyššou elektronegativitou
(elektronegativita X_p = schopnosť kovalentne viazaného atómu pritiahnuť elektrónový pár)

Atómy získavajú parciálny elektrický náboj

Kovalentný pár: väzba zdieľaním elektrónov
Iónová väzba: elektrostatické priťahovanie

$$\text{stupeň iónovosti} = 1 - e^{-\frac{1}{4}(X_p(A) - X_p(B))^2}$$

Iónový charakter prevláda pri $|X_p(A) - X_p(B)| > 1,7$

Každá väzba má kovalentný aj iónový charakter

Molekulový ión H_2^+

Hamiltonián iónu H_2^+

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M_A} \Delta_A - \frac{\hbar^2}{2M_A} \Delta_B - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_A} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_B} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R}$$

Bornova-Oppenheimerova aproximácia:

jadrá sú veľmi ťažké a preto možno ich pohyb odseparovať

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}_A, \vec{R}_B) = \varphi(\vec{r}; \vec{R}_A, \vec{R}_B) \eta(\vec{R}_A, \vec{R}_B)$$

Elektrónová časť sa dá presne riešiť!!

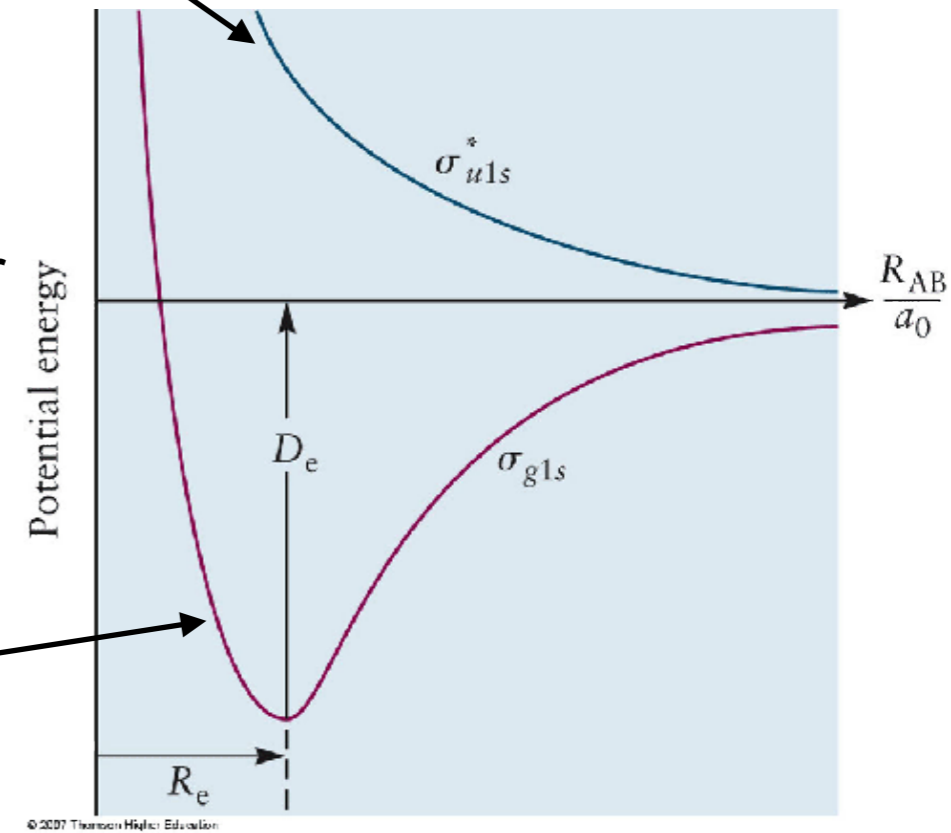
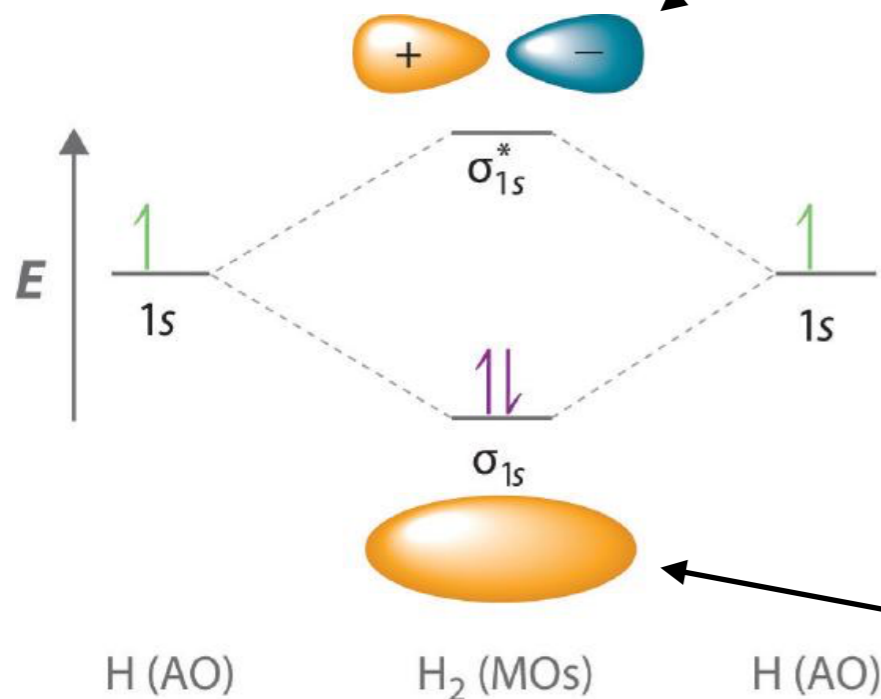
Väzbové a protiväzbové orbitály

protiväzbové

- zvyšujú energiu v porovnaní so separovanými atómami
- hustota sústredená z vonkajšej strany jadier
- aspoň jeden uzol medzi jadrami

väzbové

- znižujú energiu v porovnaní so separovanými atómami
- hustota sústredená medzi jadrami



Molekula H₂

Dvojelektrónová vlnová funkcia v BO aproximácii

Vlnová funkcia elektrónu 1 v okolí jadra A (v stave 1s): $\psi_A(\vec{r}_1)$

Pre identické častice musíme počítať s oboma možnosťami:

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N [\psi_A(\vec{r}_1)\psi_B(\vec{r}_2) \pm \psi_A(\vec{r}_2)\psi_B(\vec{r}_1)]$$

Stredná energia v týchto stavoch: dôležitá je interferencia.
Len symetrická kombinácia znižuje energiu.

Pauliho princíp: vlnová funkcia musí byť antisymetrická!
splnené v spinovej časti:

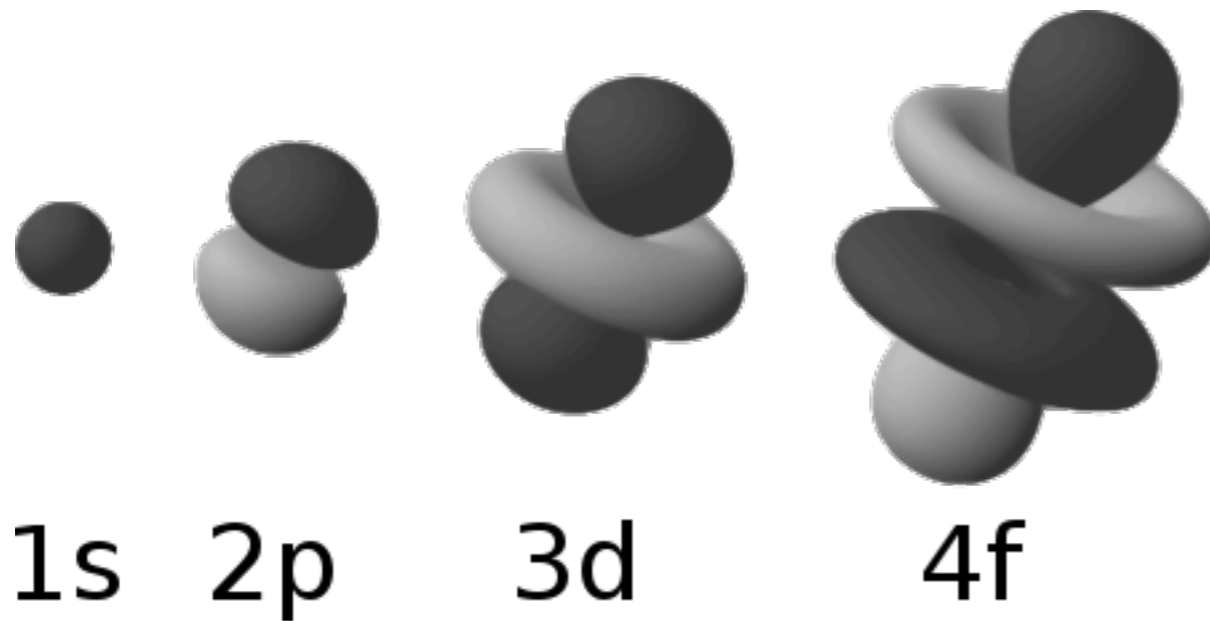
$$\Omega(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)$$

Celková vlnová funkcia

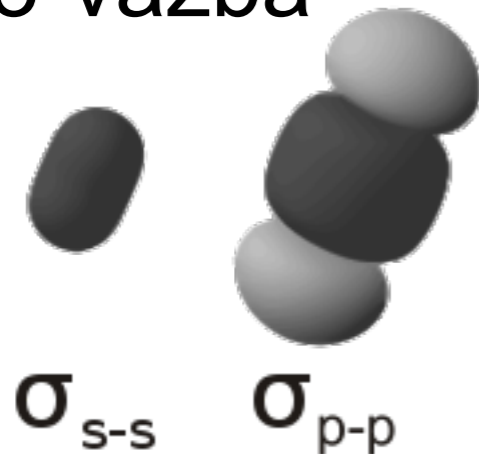
$$\Psi(1, 2) = N [\psi_A(\vec{r}_1)\psi_B(\vec{r}_2) \pm \psi_A(\vec{r}_2)\psi_B(\vec{r}_1)] \Omega(1, 2)$$

Dvojatómové molekuly z rovnakých atómov

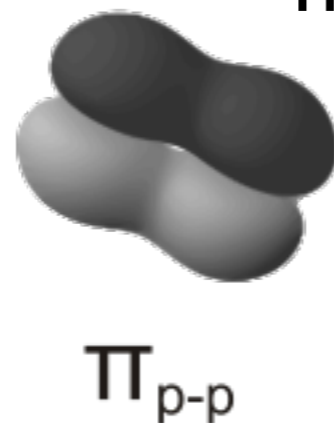
Rovnaké atómy sa môžu vzájomne previazať aj inými stavmi. Môžu sa previazať aj viacerými stavmi.



σ väzba



π väzba



Hybridizácia

Väzbové orbitály sa môžu tvoriť na základe **lineárnych kombinácií valenčných atómových orbitalov**

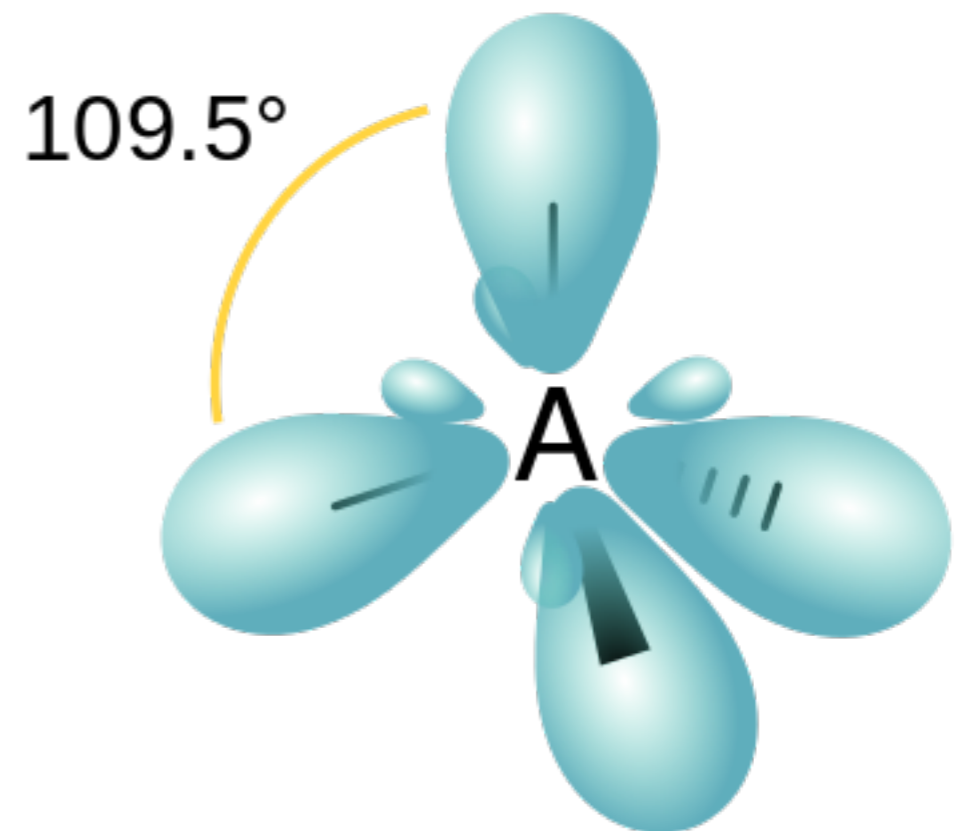
príklad: sp^3 orbitály v uhlíku

$$|h_1\rangle = |s\rangle + |p_x\rangle + |p_y\rangle + |p_z\rangle$$

$$|h_2\rangle = |s\rangle - |p_x\rangle - |p_y\rangle + |p_z\rangle$$

$$|h_3\rangle = |s\rangle - |p_x\rangle + |p_y\rangle - |p_z\rangle$$

$$|h_4\rangle = |s\rangle + |p_x\rangle - |p_y\rangle - |p_z\rangle$$



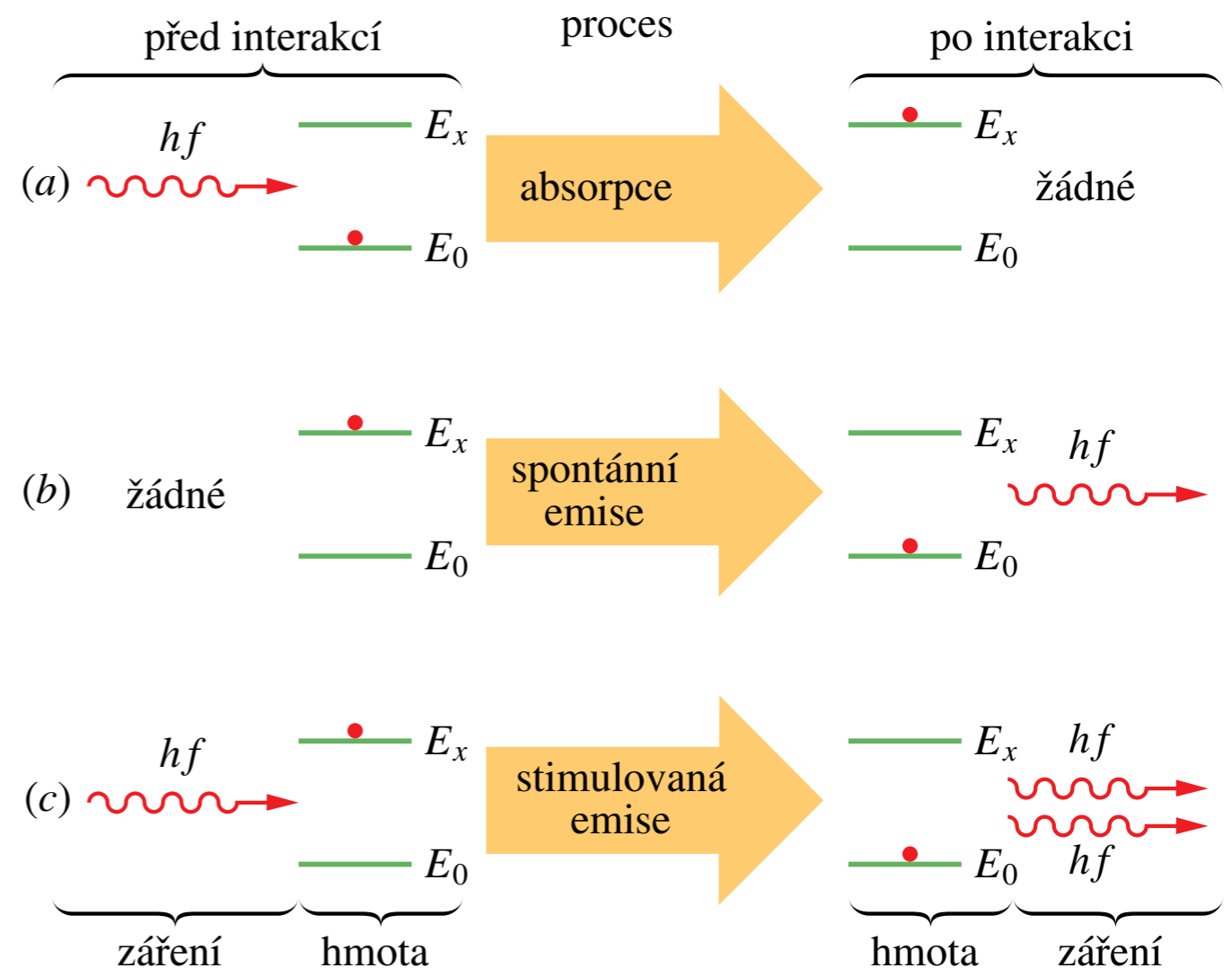
Energia týchto stavov je priemerom energií komponentov

LASER: základné procesy

Light Amplification by the Stimulated Emission of Radiation

spontánna emisia je väčšinou rýchla
pre LASER potrebujeme dlhožijúci
metastabilný stav

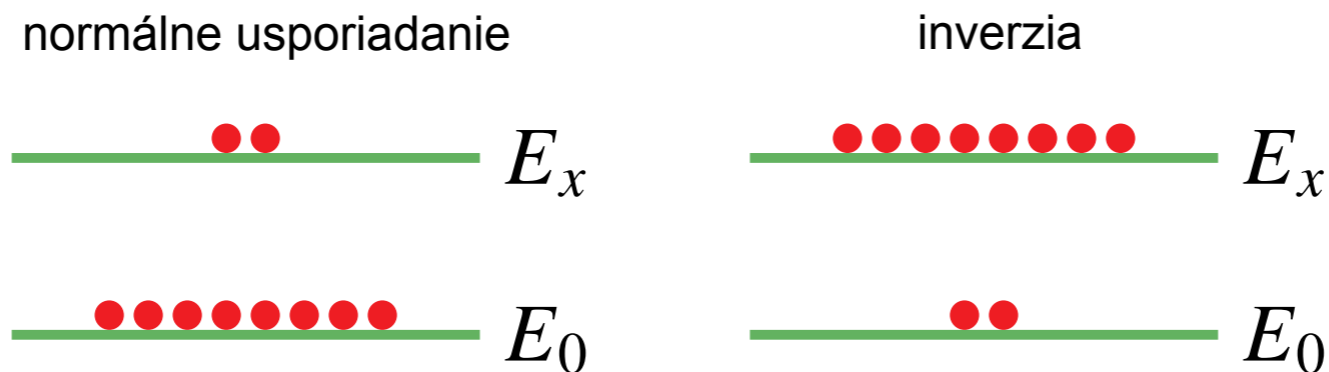
žiarenie produkované pri stimulovanej
emisii má rovnakú frekvenciu, fázu,
polarizáciu a smer ako dopadajúce
žiarenie



LASER: energetické hladiny

štatistická (termálna) populácia excitovaného stavu oproti základnému

$$N_x = N_0 \exp\left(-\frac{E_x - E_0}{k_B T}\right)$$



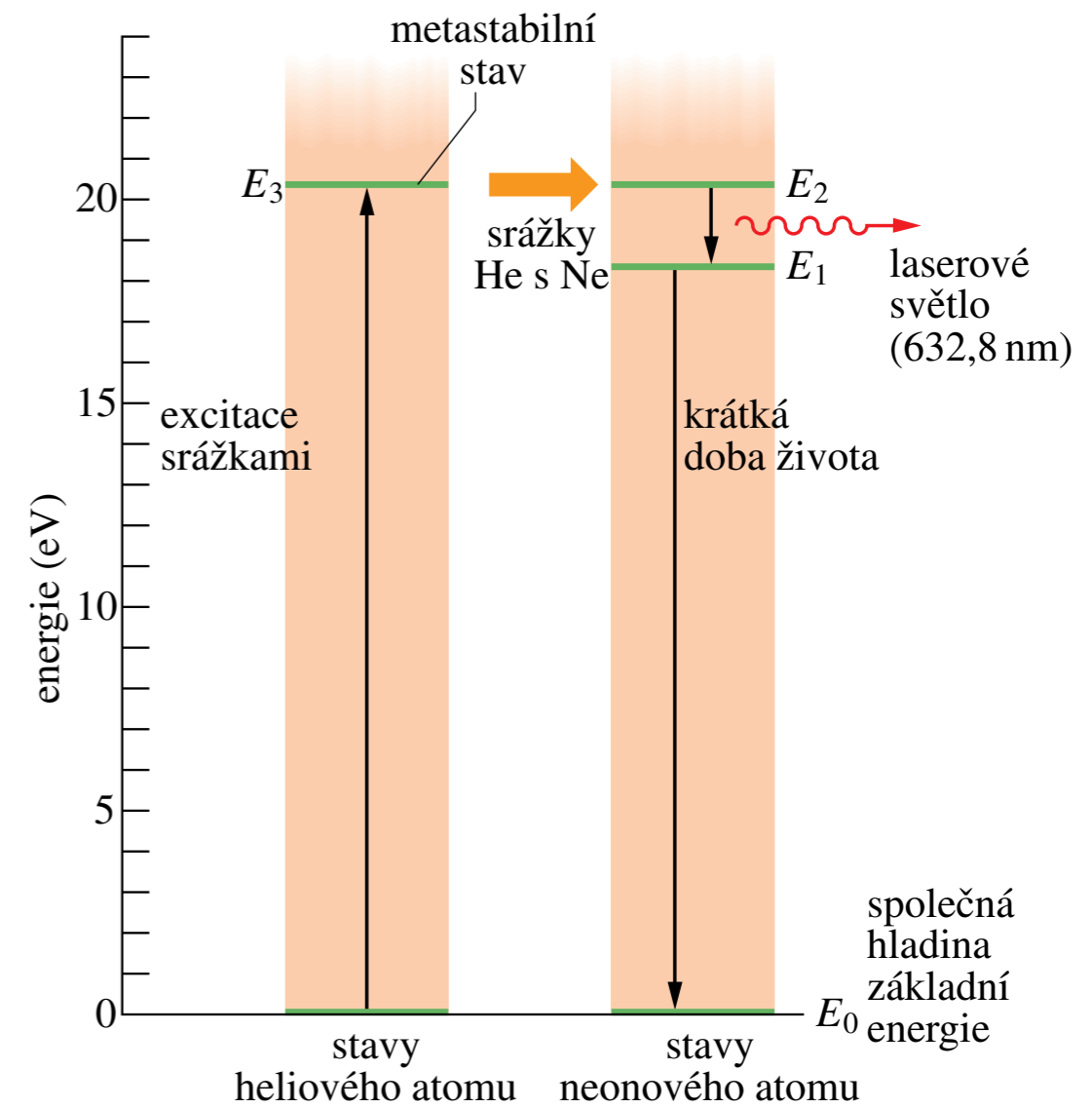
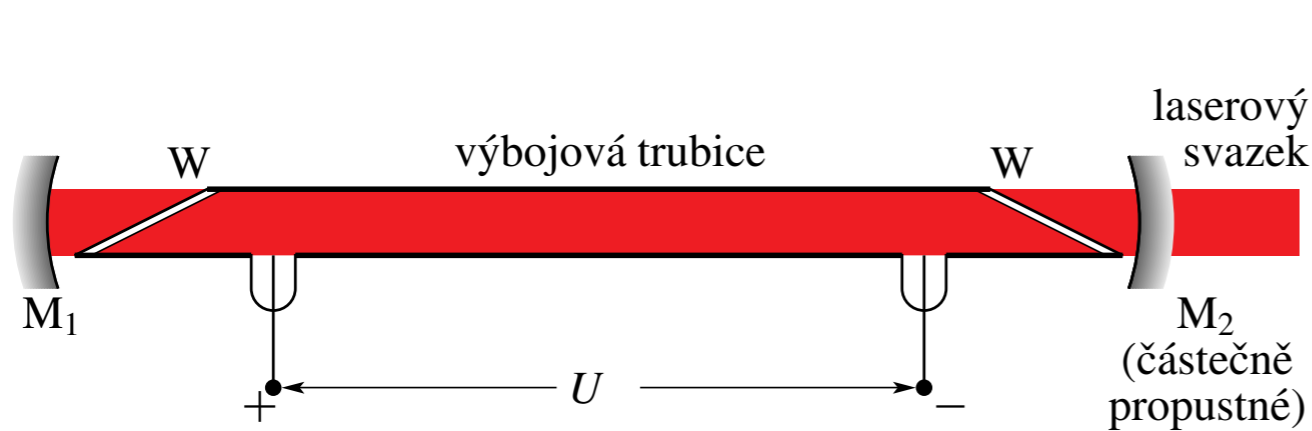
pri ožiarení s frekvenciou $(E_x - E_0)/h$ bude excitácia a stimulovaná emisia v rovnováhe, teda počet fotónov sa nezmení

Potrebujeme generovať inverziu!

Helium-neónový laser

Ali Javan a W.R. Bennet, Bell Labs, 1960

zmes He (20%) a Ne (80%, aktívne emitujúce médium)



inverzia je dosiahnutá na hladinách E_2 a E_1

- E_3 je populovaná zrážkami s elektrónmi
- E_2 je obsadzovaná v dôsledku zrážok He a Ne a predávaní excitačnej energie z He na Ne
- E_1 je nestabilná a prechádza rýchlo na E_0