účast, aktivní účast, Písemka - 3 příklady, dobrovolná písemka
potřeba spočítat n-1 příkladů

17/2

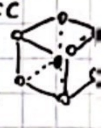
(1) chlorid sodný NaCl

kubická mřížka
plošná centrovanost FCC

$\rho = 2{,}18\ g/cm^3 =$ [redacted] $= 2{,}18 \cdot 10^{3}\ kg/m^3$

$A_r(Na) = 23$
$A_r(Cl) = 35{,}45$
$a = ?$

Bcc



(1) - převést na SI

$A_r = \frac{m_{m}}{m_u}$, $m_u \doteq 1{,}66 \cdot 10^{-27}\ kg$

FCC - 4 elem. jednotky

$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m}{a^3} =$ [redacted] +

$N(Na) = \underbrace{8 \cdot 1/8}_{\text{vrcholy}} + \underbrace{6 \cdot 1/2}_{\text{hrany}} = 4$
$N(Cl) = \underbrace{1 \cdot 1}_{\text{střed}} + \underbrace{12/4}_{\text{hrany}} = 4$

$4 \times NaCl \mapsto FCC$

Ve středu je atom Chloru

$m(Na) = 4\ m_u A_r(Na)$ $\quad m(Cl) = 4 \cdot m_u A_r(Cl)$
$m(NaCl) = 4 m_u (A_r(Na) + A_r(Cl))$
$a^3 = m/\rho \Rightarrow \boxed{a = \sqrt[3]{\frac{4 m_u\ A_r(Na) + A_r(Cl)}{\rho_{NaCl}}}} = 5{,}62 \cdot 10^{-10}\ m$

(3) LiI $\quad a = 6{,}0\ Å \quad \rho_{LiI} = ?$

$A_r(Li) = 7 \quad A_r(I) = 127$

$\rho_{LiI} = \frac{m(LiI)}{a^3} = \boxed{\frac{m_u 4 (A_r(Li) + A_r(I))}{a^3}} = 2{,}5 \cdot 10^{3}\ kg/m^3$??


SC (simple cube)


BCC


FCC

23/2

(2)

ortorombická

$m_a = A_r(PbSO_4) \cdot m_u$
$\rho = \frac{m}{V} = \frac{N \cdot m_a}{abc} = 6{,}27\ g\,cm^{-3}$
$A_r(PbSO_4) = A_r(Pb) + A_r(S) + 4 A_r(O_8)$
$= 303{,}26$
$N = \frac{\rho abc}{m_a} \doteq 4$ nejmenší (1,2,4)

Fyzika IV - cvičení

Atomistická teorie. Krystalová mříž I

(17.2.2023)

Příklad 1:
Určete mřížkovou konstantu krystalu NaCl, znáte-li hustotu $\rho = 2.18\ g.cm^{-3}$ a relativní atomové hmotnosti Na a Cl; Ar(Na)=23, Ar(Cl)=35.45.
Podotázka: Jak dlouhý by byl řetízek atomů Na a Cl z 1 mm^3 NaCl (buď v těsném uspořádání anebo ve vzdálenostech odpovídajících vzdálenostem v krystalu NaCl)?

Příklad 2:
Určete počet chemických jednotek v elementární buňce krystalu anglesitu ($PbSO_4$).
$PbSO_4$ krystalizuje v ortorombické krystalové soustavě, a=8.516Å, b=5.399Å, c=6.989Å. Hustota $PbSO_4$ je 6.27 $g.cm^{-3}$.

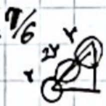
Příklad 3:
Určete hustotu jodidu lithného, víte-li, že krystaluje v kubické mřížce se 4 atomy v elementární buňce, a mřížová konstanta je a=6.0Å.

další papír se zadáním

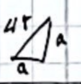
(2) $R = V_1/V_2$ $\quad V_1$ ... objem atomu $\quad V_2$ ... objem elem. buňky $\quad V_1 = 4/3 \pi r^3 \quad V_2 = a^3$ $\quad R = \frac{4/3 \pi r^3 N}{a^3}$

R - relativní zaplnění

a) prostá $R_a = \frac{4/3 \pi r^3}{a^3}$ [redacted] $\quad a = 2r \quad R_a = \frac{4/3 \pi r^3}{a^3} = \frac{4/3 \pi r^3}{8 r^3} = \pi/6$



b) Plošně centrované $R = \frac{4/3 \pi r^3 \cdot 4}{a^3}$ [redacted] $= \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$

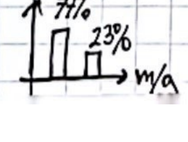


$a = \sqrt{8}\ r$

c) Prostorově $R =$ [redacted] $= \frac{4/3 \pi r^3}{a^3} = \frac{\pi \sqrt{3}}{8}$

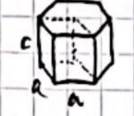
(3)

m: $F = m\vec{a}$
Q: $F = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$



1

④ $c/a = ?$ hex, 3 s.j. elem. bu.



$\rho = 7575\ kg/m^3$

$a = 6{,}999\ \mathring{A} \rightarrow 7 \cdot 10^{-10}\ m$

$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m}{c a^2 \sin\alpha}$

$m(DyNiAl) = 3 m_u \left(A_r(Dy) + A_r(Ni) + A_r(Al)\right) \doteq 124 \cdot 10^{-27}$

$c = \frac{m}{\rho a^2 \sin\alpha} = \frac{124 \cdot 10^{-27}}{(7 \cdot 10^{-10})^2 \sin 2/3\pi \ \ 7575} = 3{,}86 \cdot 10^{-10}\ m = 3{,}86\ \mathring{A}$

1/3!

$\boxed{c/a \doteq 0{,}55}$

Fyzika IV - cvičení

Krystalová struktura látek

(24.2.2023)

Příklad 1:

Kolik atomů, resp. strukturních jednotek, připadá na jednu elementární buňku a) prosté, b) prostorově centrované a c) plošně centrované kubické mřížky?

Pojmy mříž vs.hmotná báze.

Příklad 2:

Určete relativní zaplnění elementární buňky (a) prosté, (b) plošně centrované, (c) prostorově centrované kubické mříže. Uvažujte objem zabíraný atomem za kouli s poloměrem r a mřížovou konstantu o velikosti a. Spočtěte obecně a pro variantu (a) spočtěte též číselně pro případ, kdy $a = 2r$ (tj. koule se dotýkají)

Příklad 3:

Vysvětlete princip hmotového spektrometru. Ukažte na příkladě.

Příklad 4:

Určete poměr mřížových parametrů c/a pro sloučeninu DyNiAl, která krystalizuje v hexagonální mřížce a v jedné elementární buňce obsahuje 3 strukturní jednotky. Je známo, že hustota této látky je 7575 kg.m^{-3} a jeden z mřížových parametrů je $a = 6.999$ Å. Lze na základě tohoto poznatku tuto látku charakterizovat jako strukturu s nejtěsnějším uspořádáním atomů (či alespoň jemu blízkou)?

(Pozn. uvědomte si, že elementární buňka v hexagonální soustavě nemůže mít podstavu šesterečnou, nýbrž kosočtverečnou.)

3/3

③ SC

$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = 2\pi \frac{(a^2,0,0)}{a^3} = \frac{2\pi}{a}(1,0,0)$

$\vec{a}_1 = (a,0,0)$

$\vec{a}_2 = (0,a,0)$ $\quad \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = 0$

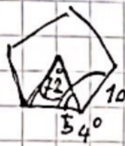
$\vec{a}_3 = (0,0,a)$ $\quad \vec{a}_1 \perp \vec{a}_2 \perp \vec{a}_3$

Příklad 3:

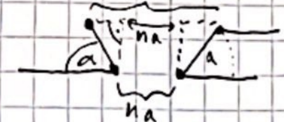
Dokažte, že reciproká mřížka ke kubické mřížce je opět kubická, tj. že $|a^*| = |b^*| = |c^*|$ a $|\alpha^*| = |\beta^*| = |\gamma^*| = \pi/2$.

④ Pětičetná osa → pětiúhelník

↳ nelze translací vyplnit celý prostor



ma NEBO



$\frac{(m-n)a}{2a} = \cos\alpha$

$\langle -1; 1 \rangle$

$m-n$	$\cos\alpha$	α
1	1/2	$\pi/3$
2	1	0
0	0	$\pi/2$
-1	-1/2	$2\pi/3$
-2	-1	π

neexistuje jiná možnost

ale kvazikrystaly mohou mít pětičetnou osu

Příklad 4:

Dokažte, že nemůže existovat pětičetná osa symetrie

10/3

① $\vec{B}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$

$d_{hkl} = \frac{2\pi}{B_{hkl}}$

kubická látka často u písemky

kubická: $\vec{B}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h,k,l)$

tetragonální: $\vec{B}_{hkl} = 2\pi\left(\frac{h}{a}, \frac{k}{a}, \frac{l}{c}\right)$

vzdálenost rovin

$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{B}_{hkl}|}$

$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{h^2/a^2 + k^2/a^2 + l^2/c^2}}$

kubická

$d_{100} = a$

$d_{110} = a/\sqrt{2}$

$d_{111} = a/\sqrt{3}$

tetragonální

—"—

$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{a^2/c^2 + 2}}$

lepší tvar

$$\boxed{\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}$$

Fyzika IV - cvičení

Krystalová struktura látek, difrakce na krystalu

(3.3.2023)

Příklad 1:

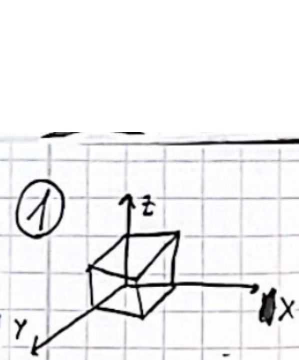
Určete vzdálenosti mezi rovinami (100), (110) a (111) v kubické mřížce s mřížkovou konstantou a (s využitím difrakčního vektoru). Pokuste se určit tytéž vzdálenosti pro případ tetragonální mřížky s mřížovými konstantami a a c.

Příklad 1: 1

Dokažte, že v případě tetragonální látky je tenzor vodivosti izotropní v bazální rovině, tj. rovině xy. *(Uvažte, že tenzor musí být invariantní vůči příslušným operacím symetrie.)*

2

①



$$\overleftrightarrow{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \qquad C_4^{(1)}(z) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\overleftrightarrow{\sigma} = \overleftrightarrow{\sigma}' = C_4^{(-1)}(z)\,\overleftrightarrow{\sigma}\,C_4^{(1)}(z) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \overleftrightarrow{\sigma} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \sigma_{12} & -\sigma_{21} & \sigma_{23} \\ -\sigma_{12} & \sigma_{11} & -\sigma_{13} \\ \sigma_{32} & -\sigma_{31} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ -\sigma_{12} & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix} \xrightarrow{C_2^{(1)}} \overleftrightarrow{\sigma} =$$

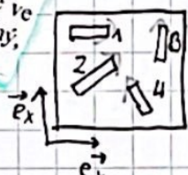
$$= \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

Příklad 2:
Z monokrystalu anisotropní látky jsou vyříznuty 4 tenké vzorky (viz obr.). Všechny vzorky mají stejnou délku a průřez (šířka a tloušťka jsou malé ve srovnání s délkou). Bylo zjištěno, že elektrický odpor vzorků 1 a 3 je stejný, $R_1 = R_3 = R$. Odpor vzorku 2 je $R_2 = R/2$. Jaký je odpor vzorku číslo 4?

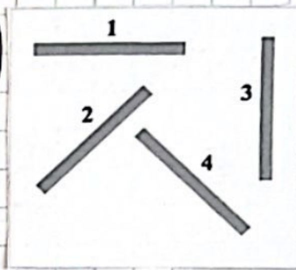
②

$\vec{j} = \sigma \vec{E}$

$$\begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix} \qquad E \sim U \qquad j \sim I$$



$$\xrightarrow{2D} \sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{21} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$$



$R = \vec{r}^{\,T} \sigma \vec{r}$

1: $(0\ 1)\,\sigma \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \dots = \sigma_{22} = R$

3: $(1, 0)\,\sigma \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \dots = \sigma_{11} = R$

2: $(1\ 1)\,\sigma \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} = \dots = \frac{1}{2}(\underbrace{2\sigma_{11}}_{2R} + \sigma_{21} + \sigma_{12}) = R/2$

$2R + \sigma_{21} + \sigma_{12} = R$

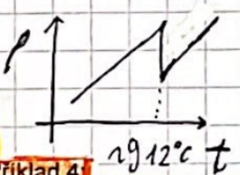
$\sigma_{21} = -R - \sigma_{12}$

4: $(1\ -1)\,\sigma \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} = \dots = \frac{1}{2}(2\sigma_{11} - \sigma_{21} - \sigma_{12}) = r = ?$

$= \frac{1}{2}(2R - (-R - \cancel{\sigma_{12}}) - \cancel{\sigma_{12}}) = \frac{1}{2} 3R = \boxed{\frac{3}{2}R = r}$

③

$$\frac{\rho_{\alpha\text{-Fe}}}{\rho_{\gamma\text{-Fe}}} = \frac{a_\gamma^3}{a_\alpha^3}\frac{N_\alpha}{N_\gamma} \doteq 1{,}0284967 \qquad \rho = \frac{m}{a^3} = \frac{m_u\, a_r(\text{Fe})\, N}{a^3} \qquad N_\alpha = 2,\ N_\gamma = 4$$



Příklad 3:
Určete poměr hustot α-Fe (Im3m, a=2.87Å) a γ-Fe (Fm3m, a=3.65Å).

Příklad 4:
V případě použití absorpčních filtrů se z celého spektra záření produkovaného rtg.lampou využijí jen spektrální čáry $K_{\alpha 1}$ a $K_{\alpha 2}$, s poměrem intenzit 2:1. Zjistěte vlnovou délku spektrální čáry $CoK_{\alpha 2}$, víte–li, difrakční maximum příslušející rtg.záření s vlnovou délkou sp.čáry $CoK_{\alpha 1}$ = 1.78897Å je pozorováno pro difrakční úhel 2θ=120°. Difrakční maximum pro sp. čáru $CoK_{\alpha 2}$ je pozorováno na difrakčním úhlu 2θ= 120.43°.

17/3

4.4

$\lambda_2 \equiv \lambda(CoK_{\alpha 2}) = ?$

$\lambda_1 \equiv \lambda(CoK_{\alpha 1}) = 1{,}78897\ \text{Å}$

$2\theta(CoK_{\alpha 1}) = 120^\circ \rightarrow \theta_1 = 60^\circ$

$2\theta(CoK_{\alpha 2}) = 120{,}43^\circ \rightarrow \theta_2 = 60{,}215^\circ$

$m\lambda = 2d \sin\theta$ v optice

$\lambda = 2d_{hkl} \sin\theta$ v krystalografii

schovám

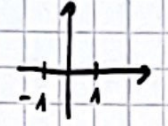
$$m\lambda = 2\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

111	222	333
$\frac{a}{\sqrt{3}}$	$\frac{a}{2\sqrt{3}}$	$\frac{a}{3\sqrt{3}}$

d společné

$\lambda_1 = 2d \sin\theta_1 \rightarrow d = \frac{\lambda_1}{2\sin\theta_1} = \dots \doteq 1{,}03286\ \text{Å}$

$\lambda_2 = 2d \sin\theta_2 \doteq \boxed{1{,}79283\ \text{Å}}$



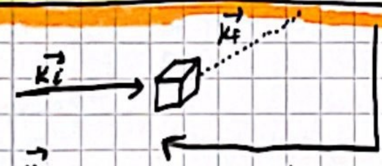
h k l		
1 1 1	$F_{111} = -4F_{Cl} + 4F_{Na}$	2n-1
2 2 2	$F_{222} = 4F_{Cl} + 4F_{Na}$	2n
1 2 3	$F_{123} = 0$	

Smíšené - nelze nic

Vše sudé nebo liché -

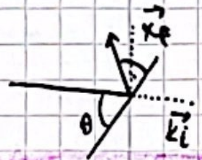
Příklad 1:
Intenzita reflektovaného záření na krystalu závisí na tzv. *strukturním faktoru* F. Stává se, že některé roviny záření díky nulové hodnotě strukturního faktoru nedifraktují (*systematická vyhasínání*). Určete pomocí strukturního faktoru v krystalu NaCl (kubická, plošně centrovaná mřížka) podmínky pro reflexe na jednotlivých rovinách.

5.2



$|\vec{k_i}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ $\quad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$\{111\} = 111, 11\bar{1}, \bar{1}\bar{1}\bar{1}$



$\vec{k_i} = \left(0, 0, -\frac{2\pi}{\lambda}\right)$ $\quad \vec{k_f} - \vec{k_i} = \vec{q} = \overrightarrow{B_{hkl}}$

$\overrightarrow{B_{hkl}} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$

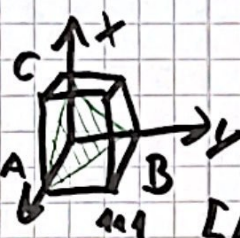
úhel se v difrakci měří od plochy a ne kolmice jako v optice

Příklad 2:
Vypočtěte polohy difrakčních skvrn na Laueho snímku a jim odpovídající vlnové délky pro krystal fluoridu lithného (LiF) pro roviny stejného druhu {111} a {402}. LiF krystaluje v kubické soustavě s plošně centrovanou mřížkou, a=4.03Å. Polychromatické rtg. záření dopadá na krystal ve směru [00-1]. Vzdálenost krystalu od filmu je 22,5 mm, film je kolmý na osu z.

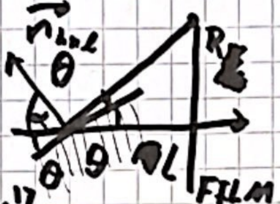
24/3

31/3 neopravená písemka - 2 příklady -

5.2

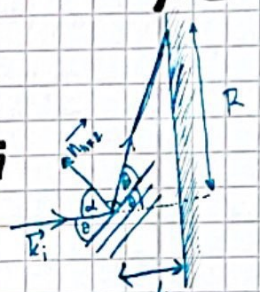


$[h', k', l']$



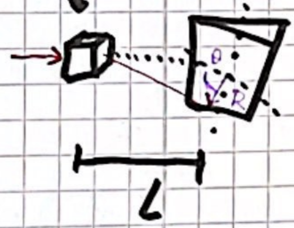
(h, k, l)

$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$



$tg\, 2\theta = R/L$

$\theta = \frac{\pi}{2} - \alpha$



$\bar{1} = -1$

$\vec{e} = (0, 0, 1)$

$\cos\alpha = \frac{-(hh' + kk' + ll')}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}\sqrt{h'^2+k'^2+l'^2}}$

$\lambda = 2d_{hkl} \sin\theta_{hkl}$

$\vec{k_i} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}$

1. pro danou rovinu hkl určíme α $\quad$ S.S. $\vec{n_{hkl}} \cdot \vec{k_i}$
2. θ, R $\quad \theta = \pi/2 - \alpha$ $\quad R = L\, tg\, 2\theta$ $\quad$ θ nikoliv 2θ
3. d, λ $\quad d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2}}$, "bragg" $\quad \lambda = 2d_{hkl} \sin\theta_{hkl}$
4. souřadnice difrakčního maxima určíme z průsečíku přímky $\vec{k_f}$ a roviny detektoru

θ, nikoliv 2θ

$(11\bar{1})$ $\quad \alpha = 57,74$ $\quad \theta = 35,26°$ $\quad R = 63,60$ mm

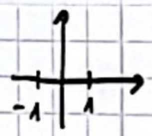
$\vec{k_f} = \overrightarrow{B_{hkl}} + \vec{k_i}$ $\quad d = 2,33$ Å, $\quad \lambda = 2,69$ Å

indexy roviny

$\overrightarrow{B_{hkl}} = \left(h\frac{2\pi}{a}, l\frac{2\pi}{b}, k\frac{2\pi}{c}\right)$

$\vec{e}_{kf} = \left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right)$ $\quad L = 22,5$ $\quad t = \frac{L}{e_{kf}^{z}} = 67,5$

$(x, y) = \left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}\right) t = (45, 45)$



h	k	l	
1	1	1	$F_{111} = -4F_{Cl} + 4F_{Na}$
2	2	2	$F_{222} = 4F_{Cl} + 4F_{Na}$
1	2	3	$F_{123} = 0$

$2n-1$
$2n$

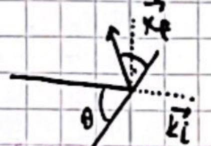
Smíšené - nelze nic pozorovat
Vše sudé nebo liché - obrazce

... na krystalu závisí na ... že některé roviny záření díky ... u nedifraktují (*systematická* ... ního faktoru v krystalu NaCl ... a) podmínky pro reflexe na

5.2

$|\vec{k_i}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ $\quad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$\{111\} = 111, 11\bar{1}, \bar{1}\bar{1}\bar{1}$



$\vec{k_i} = \left(0, 0, -\frac{2\pi}{\lambda}\right)$ $\quad \vec{k_f} - \vec{k_i} = \vec{q} = \overrightarrow{B_{hkl}}$

$\overrightarrow{B_{hkl}} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$

úhel se v difrakci měří od plochy a ne kolmice jako v optice

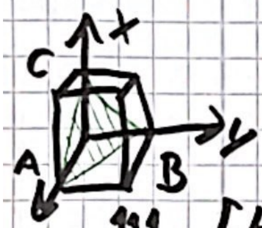
Příklad 2:
Vypočtěte polohy difrakčních skvrn na Laueho... odpovídající vlnové délky pro krystal fluoridu lith... roviny stejného druhu {111} a {402}. LiF kryst... soustavě s plošně centrovanou mřížko... Polychromatické rtg. záření dopadá na krystal ve... Vzdálenost krystalu od filmu je 22,5 mm, film je kolm...

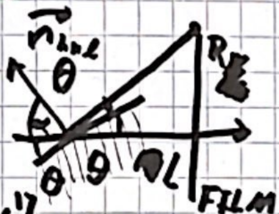
$\{111\}$ $\quad \{402\}$

24/3

31/3 nepovinná písemka - 2 příklady -

5.2





$[h', k', l']$

(h, k, l)

$\bar{1} = -1$

$\vec{e} = (0, 0, 1)$

$\vec{k_i} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}$

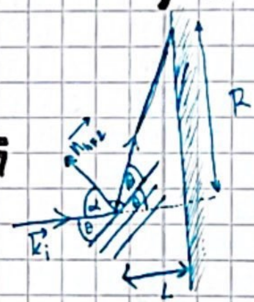
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

$$\operatorname{tg} 2\theta = R/L$$

$$\theta = \frac{\pi}{2} - \alpha$$

$$\cos\alpha = \frac{-(hh' + kk' + ll')}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}\sqrt{h'^2+k'^2+l'^2}}$$

$$\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta_{hkl}$$



1. pro danou rovinu hkl určíme α $\quad$ S.S. $\vec{n_{hkl}} \cdot \vec{k_i}$
2. θ, R $\quad \theta = \pi/2 - \alpha \quad R = L \operatorname{tg} 2\theta$
3. d, λ $\quad d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2}}$, "bragg" $\quad \lambda = 2d_{hkl}\sin\theta_{hkl}$ $\quad \theta$ nikoliv 2θ
4. souřadnice difrakčního maxima určíme z průsečíku přímky $\vec{k_f}$ a roviny detektoru

θ, nikoli v 2θ

$(11\bar{1})$ $\quad \alpha = 57{,}74 \quad \theta = 35{,}26 \quad R = 63{,}60$ mm

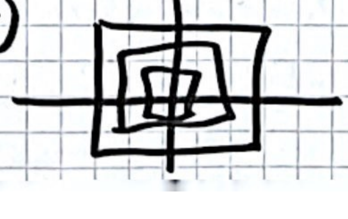
$\vec{k_f} = \overrightarrow{B_{hkl}} + \vec{k_i}$ $\quad d = 2{,}33$ Å $, \quad \lambda = 2{,}69$ Å

indexy roviny

$\overrightarrow{B_{hkl}} = \left(h\frac{2\pi}{a}, l\frac{2\pi}{b}, k\frac{2\pi}{c}\right)$

$\vec{e_{kf}} = \left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right) \quad L = 22{,}5 \quad t = \frac{L}{e_{k_f z}} = 67{,}5$

$(x, y) = \left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}\right)t = (45, 45)$



Vlnově-částicový dualismus

6.1

$\lambda_1 = 1{,}7\,\mathring{A}$

$\lambda_2 = 2{,}4\,\mathring{A}$

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{mv}} \Rightarrow v = \frac{h}{m\lambda}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$\boxed{\begin{aligned} v_1 &= 2327{,}08 \text{ m/s} \\ v_2 &= 7648{,}35 \text{ m/s} \end{aligned}}$$

relativisticky

$$\lambda = \frac{h}{m_0 v}\sqrt{1 - v^2/c^2}$$

$$\Rightarrow v = \sqrt{\frac{1}{\frac{\lambda^2 m_0^2}{h^2} + 1/c^2}}$$

Příklad 1:
Jakou rychlostí se pohybuje neutron s vlnovou délkou λ = 1,7 Å a λ = 2,4 Å?

6.2

$$p = \sqrt{\frac{E_k^2}{c^2} + 2m_0 E_k}$$

klidová energie, kinetická energie

$$E = m_0 c^2 + E_k \approx m_0 c^2 \qquad \frac{E_k}{c^2} << m_0$$

Podobný příklad nás spíše bude v písemce ale nerelativisticky

$$\frac{8 \cdot 10^3 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}}{9 \cdot 10^{16}} << 1{,}6 \cdot 10^{-27}$$

neutrony, protony : $10^{-32} << 10^{-27}$

elekt[redacted]ny : $10^{-32} < 9 \cdot 10^{-31}$

Příklad 2:
Porovnejte vlnové délky elektronů, protonů, neutronů a rtg. záření pro E = 8 keV. Jak se liší rychlosti jednotlivých částic? Jaké to má důsledky pro difrakční experiment?

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_k}}$$

$\lambda_p \doteq 3{,}2 \cdot 10^{-13}$ m

$\lambda_n \doteq 3{,}198 \cdot 10^{-13}$ m

$\lambda_e = $ rel. $1{,}366 \cdot 10^{-11}$ m ; nerel. $1{,}371 \cdot 10^{-11}$ m

$$\lambda_{Rtg} = \frac{ch}{E} = 1{,}55\,\mathring{A}$$

$$|\sin\theta| = \frac{\lambda}{d_{hkl}} \leq 1$$

$$v = \sqrt{\frac{2E_k}{m_0}}$$

$v_{Rtg} = c$

$v_p \doteq 1{,}238 \cdot 10^6$ m/s

$v_n \doteq 1{,}237 \cdot 10^6$ m/s

$v_e \doteq 53{,}048 \cdot 10^6$ m/s $(52{,}485 \cdot 10^6$ m/s$)$

$$C_V = 9 N_A k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2}\,dx$$

...rní teplo molu

Debyeova teplota $\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

difrakce

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}$$

Laue: $\vec{q} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \equiv \overrightarrow{B_{hkl}}$

$2\pi(h/a, k/a, l/a)$

Bragg: $\boxed{2 d_{hkl} \sin\theta = \lambda}$

$R = \vec{r}^T \sigma \vec{r}$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{B}_{hkl}|}$$

$E_n = -R_y \frac{1}{n^2}$

$\Delta E = E_m - E_n = R_y \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$

$1 \text{Å} = 100\,\text{pm} = 10^{-10}\,\text{m}$

$R = \vec{r}^T \sigma \vec{r}$

odpor

izotropní → invariantní vůči rotaci
obalit maticemi rotace → diagonální

Strukturní faktor: $F_{hkl} = \sum_n f_n(hkl)\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_n}$

$\lambda_{dB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$

$Q = \{Q\}[Q]$

$S(m)$

$E_\gamma = h\nu$

$\lambda\nu = c$

$1\,R_y = \frac{m_e e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2} = \frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2} = 13{,}605\,\text{eV}$

$\{Q\} = Q/[Q]$

$v_e = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}$

14/4

difrakční úhel $\boxed{2\theta}$

7.1 $U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$ přitažlivý + odpudivý člen

chceme ukázat, že $m > n$, konfigurace stabilní

$$\frac{dU}{dr} = \frac{d}{dr}\left(-\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}\right) = 0$$

$$\frac{\alpha n}{r^{n+1}} - \frac{\beta m}{r^{m+1}} = 0$$

Příklad 1:
Ukažte, že exponenty ve výrazu pro potenciální energii atomů ve vzdálenosti r

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$$

musí splňovat nerovnost m > n má–li být dosaženo stabilní konfigurace.

$$\frac{n\alpha}{r^{n+1}} = \frac{m\beta}{r^{m+1}}$$

$$\frac{r^{m+1}}{r^{n+1}} = \frac{m\beta}{n\alpha} \qquad r = \sqrt[m-n]{\frac{\beta}{\alpha}\frac{m}{n}}$$

$$\frac{d^2U}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left(\frac{n\alpha}{r^{n+1}} - \frac{m\beta}{r^{m+1}}\right) > 0$$

$$-\frac{n(n+1)\alpha}{r^{n+2}} + \frac{m(m+1)\beta}{r^{m+2}} > 0$$

$$\frac{r^{n+2}}{r^{m+2}} < \frac{m\beta}{n\alpha}\frac{m+1}{n+1}$$

$$\frac{\beta m}{\alpha n} < \frac{\beta m}{\alpha n}\frac{m+1}{n+1} \qquad n+1 < m+1$$

$\boxed{m > n}$

Scanned with CamScanner

Příklad 2:
Necht' potenciální energie částice v poli jiné částice závisí na vzdálenosti mezi jejich středy dle vztahu

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^8},$$

kde α a β jsou konstanty. Ukažte, že:

- obě dvě částice tvoří stabilní konfiguraci pro

$$r = r_0 = \left(\frac{8\beta}{\alpha}\right)^{\frac{1}{7}}$$

- v případě stabilní konfigurace je energie přitažlivých sil 8 x větší než energie odpudivých sil
- celková poteciální energie dvou částic při stabilní konfiguraci je

$$U_{st} = -\frac{7}{8}\left(\frac{\alpha^8}{8\beta}\right)^{\frac{1}{7}} = -\frac{7}{8}\cdot\frac{\alpha}{r_0}$$

- molekula se rozpadne, jakmile působící síla vzdálí od sebe částice na vzdálenost

$$r = \left(\frac{36\beta}{\alpha}\right)^{\frac{1}{7}} = (4.5)^{\frac{1}{7}} . r_0$$

7.2

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^8}$$

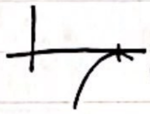
- $U'\left(r_0 = \left(\frac{8\beta}{\alpha}\right)^{1/7}\right) = \frac{\alpha}{r_0^2} - \frac{8\beta}{r_0^9} = \frac{\alpha}{\left(\frac{8\beta}{\alpha}\right)^{2/7}} - \frac{8\beta}{\left(\frac{8\beta}{\alpha}\right)^{9/7}} = \frac{\alpha^{9/7}}{\beta}\left(8^{2/7} - 8^{2/7}\right) = 0$ ✓
- viz předchozí příklad
- $U\left(\left(8\beta/\alpha\right)^{1/7}\right) = -\frac{\alpha}{\left(\frac{8\beta}{\alpha}\right)^{1/7}} + \frac{\beta}{\left(\frac{8\beta}{\alpha}\right)^{8/7}} = \frac{\alpha^{8/7}}{\beta^{1/7} \cdot 8^{1/7}}\left(-1 + 1/8\right) = -\frac{7}{8}\frac{\alpha}{r_0}$

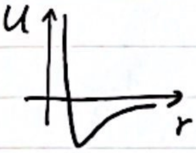
$$-\nabla U = F = -\frac{\alpha}{r^2} + \frac{8\beta}{r^9} = 0$$

znaménka?

$$\alpha r^7 = 8\beta$$

$$r = \left(8\beta/\alpha\right)^{1/7}$$





$$\frac{dF}{dr} = -\frac{d^2U}{dr^2} = \frac{\alpha n(n+1)}{r^{n+2}} - \frac{\beta m(m+1)}{r^{m+2}} = 0$$

zadání $r = \left(\frac{36\beta}{\alpha}\right)^{1/7}$

$$= \frac{2\alpha}{\left(\frac{36\beta}{\alpha}\right)^{3/7}} - \frac{\beta\cdot 8\cdot 9}{\left(\frac{36\beta}{\alpha}\right)^{10/7}} \stackrel{?}{=} 0$$

7.3

Příklad 3:
Odhadněte teplotu tání Ag (strukturu stříbra modelujte aproximací tuhých koulí). Mřížková konstanta stříbra je $a = 4.1$ Å, modul pružnosti E = 43.6 GPa.

Ag FCC

$a = 4{,}7$ Å

$E = 43{,}6$ GPa

$a_m = \sqrt{2}/2$

maximální výchylka (vychází z modelu)

$A_{max} = 0{,}15\ a_m = 0{,}15\ \frac{\sqrt{2}}{2} a$

$1/2\ k_B T$ ekvipartiční teorém

$1/2\ \kappa A^2 = 2\frac{1}{2}k_B T$

a_m

$k = F/x = \frac{\sigma a^2}{\varepsilon \cdot k} = E a$

$$T = \frac{A^2 E a}{2k_B} = \frac{0{,}15^2\ E a^3}{4\ k_B} \sim 1234{,}3\,K = 961{,}1\,°C$$

21/4

Příklad 1:

Ukažte, že molární teplo C_V podle Debyeovy teorie dosahuje hodnot 3R při vysokých teplotách, když $\Theta/T \to 0$.

1

$$C_V = 9 N_A k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2}\,dx \approx 9 N_A k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} x^2 + x^3\,dx =$$

T.R. $\frac{x^4\left(1+x+\frac{x^2}{2}+O(x^3)\right)}{\left(1+x+x^2/2-1\right)^2} = \frac{x^4+x^5+O(x^6)}{x^2+O(x^3)} = x^2+x^3+O(x^4)$

$$= 3\cancel{9} N_A k_B \cancel{\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3}\left[\cancel{\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^3}\frac{1}{3} + \left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^4 \frac{1}{4}\right] = 3\overbrace{N_A k_B}^{R} = 3R$$

drobné aproximace

8.2 $C_V = 9N_A k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \underbrace{\frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2}}_{\cancel{\ }\ \cancel{\ }} dx \overset{T\to 0}{\approx} 9N_A k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} dx =$

staťe toto

$= 234\, k_B N_A \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$ $\qquad \frac{4\pi^4}{15} \approx 26$

Příklad 2:

Ukažte, že při nízkých teplotách je molární teplo látky podle Debyeovy teorie úměrné třetí mocnině teploty.

Debyeovo přiblížení

$C_V = 9N_A k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} dx$

28/4

9.1 $F_g = G\frac{m_e m_p}{r^2}$ $\qquad F_C = k\frac{q_e q_p}{r^2}$

G, m_p, m_e, q_e, q_p, k známe $\qquad r_1 = 0{,}53\,\text{Å}$

$F_g = 3{,}67\cdot 10^{-47}\,N$, $F_e = -8{,}21\cdot 10^{-8}\,N$

$\boxed{\frac{F_g}{F_e} = -1{,}01\cdot 10^{-40}}$

Příklad 1:

Porovnejte gravitační přitažlivou sílu mezi protonem a elektronem v základním stavu vodíkového atomu s coulombovskou přitažlivou silou. Poloměr první kvantové dráhy je $r_1 = 0.53$Å.

Příklad 2:

Určete ionizační energii elektronu v základním stavu vodíkového atomu. Vyjádřete tuto energii v eV.

9.2 $E = \frac{1}{2}mV_n^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r_n}$

$L_n = n\hbar$

$m\frac{V_n}{r_n} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r_n^2} \quad / m r_n^3$

$\underbrace{m^2 V_n^2 r_n^2} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} m r_n$

$L_n^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} m r_n = n^2\hbar^2$

$\Downarrow$ $\qquad a_0 \doteq 0{,}53\,\text{Å}$

$r_n = n^2 \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = a_0 n^2$

$V_n = \frac{p_n}{m} = \frac{L_n}{r_n m_e} = \frac{n\hbar}{m_e r_n}$

$E_n = \frac{-me^4}{32\pi^2\hbar^2\varepsilon_0^2}\frac{1}{n^2}$

$= R_y \doteq 13{,}61\,eV$

$\boxed{E_1 \doteq -13{,}61\,eV}$

9.3 typový příklad do písemky

energie elektronu na dráze n:

$m = 4$
$s = 2$
$\lambda = ?\ nm$

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

$$e'^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$h\nu = E_m - E_s = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\left(\frac{1}{s^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 hc}\left(\frac{1}{s^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

$R_\infty / R = 10\ 973\ 731,568\ 160(21)\ [m^{-1}]$

$\boxed{\lambda = 486{,}009\ nm}$ H_β

Příklad 3:

Na základě Bohrova modelu určete vlnovou délku elmg.záření emitovaného vodíkovým atomem při přechodu elektronu z kvantové dráhy $m = 4$ na kvantovou dráhu $s = 2$.

10.3 a 10.4 ... bude vyvolávat

10.3 ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ Cd ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ← Ne

5/5

10.1

$P = 60\ W$
$\lambda = 600\ nm = 10^{-9}\ m = 10\ \mathring{A}$
$t = 1\ min = 60\ s$
$c = 3\cdot 10^8\ m/s$
$\hbar = 6{,}626\ 10^{-34}\ J$

$E = N E_0$ N = počet fotonů

$\boxed{E_0 = \hbar\nu} = \hbar c/\lambda$

$\boxed{A = Pt = N E_0} = \frac{N\hbar c}{\lambda}$

$$N = \frac{Pt\lambda}{\hbar c} = \frac{60\ W\ 60\ s\ 10^{-9}\ m}{6{,}62\cdot 10^{-34}\ Js\ 3\cdot 10^8\ m/s} \sim 5{,}4381\ 10^{19}\ \text{fotonů}$$

Příklad 1:

Kolik fotonů za minutu emituje žárovka s výkonem 60 W, jestliže předpokládáme, že vyzařuje monochromatické světlo vlnové délky $\lambda = 600$ nm?

10.2

$U = 10\ V$
$\lambda = ?$

$$\lambda = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{m_e\sqrt{\frac{2T}{m_e}}} = \frac{h}{\sqrt{2Uem_e}} = \frac{6{,}6\cdot 10^{-34}\ Js}{\sqrt{2\cdot 10\ 000\ V\cdot 1{,}602\cdot 10^{-19}\ C\cdot 9{,}1\cdot 10^{-31}\ kg}} =$$

$= 0{,}0122\ nm = \boxed{0{,}122\ \mathring{A}}$

$T = \frac{1}{2}mv^2 = U\cdot e$

Příklad 2:

Jaká je vlnová délka elektronů urychlených v elektrickém poli s napětím 10kV (bez relativistických korekcí)?

10.4 $E_n = -R_y \frac{1}{n^2}$ $m \neq \Rightarrow m = 2$

Příklad 4:

Pro excitaci elektronu ze základního kvantového stavu atomu vodí
($n = 1$) do prvního excitovaného stavu ($m = 2$) je možno použít dopa
jiného elektronu urychleného na vhodnou rychlost.
Stanovte energii E elektronu potřebného k takové excitaci a velikc
elektrického napětí U, kterým je potřeba dopadající elektron k získá
takové energie urychlit

$R_y = 13{,}6\ eV$

$\Delta E = E_m - E_n = R_y \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) = 11{,}6 \left(1 - \frac{1}{4}\right) \doteq 10{,}2\ eV$

$E = eU$

$\boxed{10{,}2\,e\!\!\!/V = e\!\!\!/U}$

byl u přijímačky na magistra

10.3 Cd, Cd^{2+} $\underset{Kr}{}[4d^{10} 5s^2]$

Příklad 3:

Určete pomocí Hundových pravidel základní stav atomu a iontu Cd a
Cd^{2+}, víte-li, že valenční stav lze popsat konfigurací $_{Kr}[4d^{10}5s^2]$.

$S =$
$L =$
$J = |L - S|$ $/ (L+S)$

Cd ${}^{0}X_{0} = {}^{2S+1}X_{J}$

l: -2	-1	0	1	2
↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓

d

↑ ~ 1/2
↓ ~ −1/2

$S = 5 \cdot \frac{1}{2} - 5\frac{1}{2} = 0$

$L = \sum l_i = \underline{\underline{0}}$

$J = 0 \rightarrow {}^{1}S_{0}$ ← term

Cd^{2+} $[4d^8 5s^2]$

	l −2	−1	0	1	2
Cd^{2+}	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑

$S = 5 \cdot \frac{1}{2} - 3\frac{1}{2} = 1$

$L = -2 - 2 + 4 = +3$ ${}^{3}F_{4}$

$J = 4$

Bonuspříklad 1

Pro excitaci elektronu ze základního kvantového stavu atomu vodíku (n=1) do prvního excitovaného stavu (m=2) je možno použít dopadu jiného elektronu urychleného na vhodnou rychlost.

a) Stanovte energii E elektronu potřebného k takové excitaci a velikost elektrického napětí U, kterým je potřeba dopadající elektron k získání takové energie urychlit.

b) Určete vlnovou délku λ_e a rychlost v_e dopadajícího elektronu těsně před dopadem a stejně tak i fotonu (λ_γ, v_γ), který bude vyzářen při následné deexcitaci elektronu zpět do základního stavu.

c) Rozhodněte, která z částic {foton, elektron, neutron} o této energii E bude nejvhodnější k difrakčnímu experimentu pro studium krystalové mříže pevných látek?

(Povolená nápověda: 1Ry = 13,6 eV; $m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$kg (hmotnost elektronu); $m_n = 1{,}6 \cdot 10^{-27}$kg (hmotnost neutronu) Číselná vyjádření stačí vhodně zaokrouhlit.)

a) $E = R_y\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) = R_y \frac{3}{4} =$
$= 10{,}2\ eV$

$E = eU$ $\boxed{10{,}2\,eV = eU}$

$h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ Js
$e = 1{,}602 \cdot 10^{-19}$ C
$c = 2{,}99 \cdot 10^8$ m/s

b) $v_e = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 1{,}602 \cdot 10^{-19} \cdot 10{,}2}{9{,}1 \cdot 10^{-31}}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 1{,}602 \cdot 10{,}2}{9{,}1} \cdot 10^{12}} \doteq \boxed{1{,}9 \cdot 10^6\ m/s} = v_e$

$\lambda_e := \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 1{,}9 \cdot 10^6} = \frac{6{,}626}{9{,}1 \cdot 1{,}9} \cdot 10^{-9} \doteq 3{,}83 \cdot 10^{-10}\ m = \boxed{3{,}83 \cdot 10^{-1}\ nm} = \lambda_e$

$\frac{1}{\lambda_\gamma} = R_y \frac{1}{hc}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \Rightarrow \lambda_\gamma = \frac{4hc}{3R_y} = \frac{4 \cdot 6{,}626 \cdot 2{,}99 \cdot 10^{-34} \cdot 10^8}{3 \cdot 13{,}6 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}} \doteq 1{,}21 \cdot 10^{-7}\ m = \boxed{121\ nm = \lambda_\gamma}$ $\boxed{v_\gamma = c = 2{,}99 \cdot 10^8}$

c) $\lambda_n = \frac{h}{\sqrt{2m_n E}} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-27} \cdot 10{,}2 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}}} = \frac{6{,}626}{\sqrt{2 \cdot 1{,}6 \cdot 10{,}2 \cdot 1{,}6}} 10^{-34 + \frac{1}{2}(27+19)} = 10^{-11} \cdot 0{,}91 = 9{,}16 \cdot 10^{-10}\ m = \boxed{9{,}16 \cdot 10^{-1}\ nm = \lambda_n}$

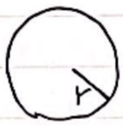
$\sin\theta\ 2d = \lambda \Rightarrow \arcsin\left(\frac{\lambda}{2d}\right) = \theta$ $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ $a \approx 10^{-10}$, $h, k, l \in N$ $\boxed{\text{NEUTRON}}$ - mají vlastní magnetický moment (lze zkoumat i mag. strukturu), nerozptylují se na elektronovém obalu

$F = eE = e\frac{U}{s} = m_e a$ $s = \frac{1}{2}at^2$ $v = at = \frac{eU}{sm_e}t = \frac{eU}{\sqrt{\frac{1}{2}e\frac{U}{m_e}}} = \boxed{\sqrt{\frac{2eU}{m_e}}}$

$s = \frac{1}{2}e\frac{U}{sm_e}t^2 \Rightarrow s = \sqrt{\frac{1}{2}e\frac{U}{m_e}}\,t$

12/5

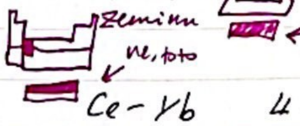
ewaldova konstrukce



$r \sim \frac{1}{\lambda}$

Příklad 2:
Najděte elektronové konfigurace (základní stavy, termy) vybraných atomů, iontů, Hundova pravidla
Ce^{3+}, Pr^{3+}, Nd^{3+}, Pm^{3+}, Sm^{3+}, Eu^{3+}, Gd^{3+}, Tb^{3+}, Dy^{3+}, Ho^{3+}, Er^{3+}, Ce^{3+}, Tm^{3+}, Yb^{3+}, V^{3+}
Ti^{3+}, V^{4+}, Fe^{3+}, Fe^{2+}....

50% šance na Ve/Ge



4f nezapl.

11 ② Ce^{3+}: $[Xe]\ \underbrace{6s^2\ 5d^1}_{3+}\ 4f^1$

1S
3P
5D
7F

+3 +2 +1 0 -1 -2 -3
↑ | | | | | |

$S = \frac{1}{2}$ $L = 3$ $J = \frac{5}{2}$

$^2F_{5/2}$

$^{2S+1}X_J$

X: S, P, D, F, G, H, I
l: 0 1 2 3 4 5 6

• Nd^{3+}: $[Xe]\ 6s^2\ 5d^1\ 4f^3$

4f: +3 +2 +1 0 -1 -2 -3
↑ ↑ ↑ | | | |

$m = 3 \Rightarrow S = 3/2$
$L = 6$ $J = 6 - 3/2 = 9/2$

$^4I_{9/2}$

• Ti^{3+}: $[Ar]\ 4s^1$

0
↑

1S
3P
5D

$m = 1$
$S = 1/2$
$L = 0$
$J = S + L = \frac{1}{2}$

$^2S_{1/2}$

C^{4+}: nemagnetické $^1S_0$

• Gd^{3+}:

4F: 3 2 1 0 -1 -2 -3
↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑

$S = 7/2$ $L = 0$ $J = 7/2$

S … součet spinů v val. slupce
L … součet čísel nad dvířkem krát počet šipek v nich
J … $J = |L - S|$ $< \frac{1}{2}$
$J = L + S$ $> \frac{1}{2}$

• Dy^{3+}:

4f: 3 2 1 0 -1 -2 -3
↑↓ ↑↓ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑

Orbitaly jsou $(2l+1)$ degenerované
excitovaný vztah: rozbít poslední dvojici šipek a jednu přesunout do nejbližšího volného čtverečku
více nezaplněných orbitálků … sčítají se S, J a X
zaplnění orb. s nejnižší energií $= n + l$, pro $n+l$ stejné má nižší energii ten s nižším n
$\underbrace{1S}_{1}\ \underbrace{2S}_{2}\ \underbrace{2P\,3S}_{3}\ \underbrace{3P\,4S}_{4}\ \underbrace{3D\,4P\,5S}_{5}\ \underbrace{4D\,5P\,6S}_{6}\ \underbrace{4F\,5D\,6P\,7S}_{7}\ \underbrace{5F\,6D\,7P\,8S}_{8}\ldots$
Zjednodušený zápis: vzácný plyn (ten na konci řady) o řádek výše … číslo u 1. dalšího orbitalu = číslo řádku zkoumaného prvku, tím je S
Fucking vzácná glína $X: [Xe]\ 6S^2\ 5d^1\ 4f^y$ $X^{+3}: [Xe]\ 4f^y$