

# Atomová fyzika

Modely atomu vodíku, stimulované záření, lasery. Atomy s více elektrony, Mendělejevova periodická tabulka prvků, pravidla obsazování elektronových hladin v atomech, Pauliho vylučovací princip, Hundovo pravidlo. Franckův – Hertzův pokus, ionizační energie. Pásová struktura energií elektronů v látkách a její důsledky. Chemická vazba – kovalentní, kovová a iontová. Charakteristické vlastnosti kovů, polovodičů a izolantů.

# Atomová fyzika

Atomová fyzika se zabývá vlastnostmi atomů vcelku

- chemická vazba, chemie
- izotopy, fyzikální parametry
- spektrum vyzařovaného záření
- ...

# Atom

atomos=nedělitelný (fyzikálně)

Démokritos

- Dělení látek na části, slučování látek  
(Avogadrův zákon)
- Experimenty s rozptylem částic  
(Rutherford, Thompsonův „pudingový“  
model)

# Složení atomu

- Jádru ( $10^{-15}\text{m}$ ), složeno z nukleonů (protony, neutrony), obsahuje většinu hmoty atomu
- Elektronový obal ( $10^{-12}\text{m}$ ), obsahuje elektrony s diskrétními energiemi (elektronové slupky, podslupky), elektrony zodpovědné za charakteristiky vyzařovaného záření, uspořádání v tabulce

# Thompsonův model atomu

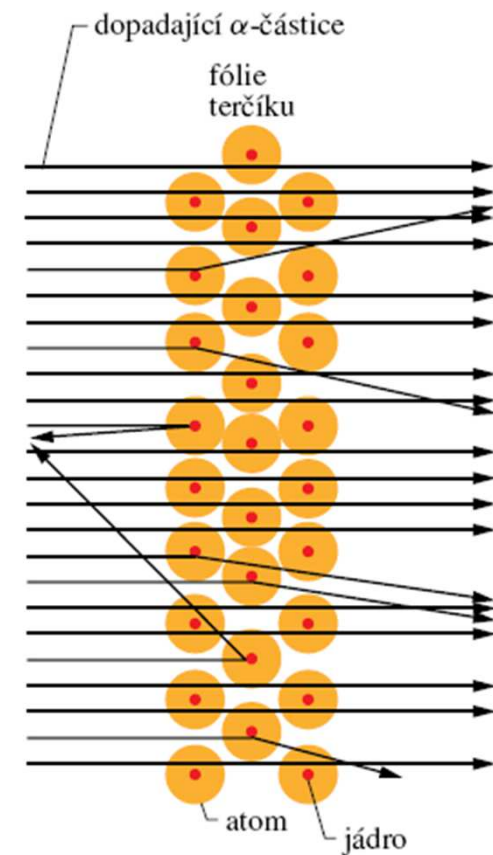
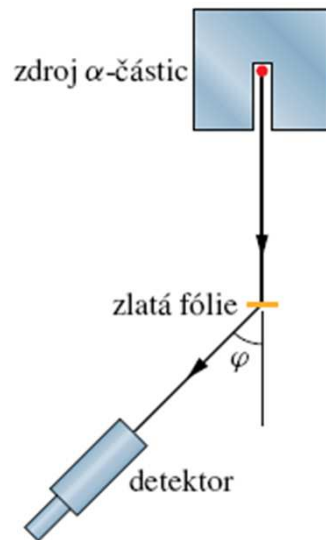
1898 – J.J.Thompson

“pudinkový“ model atomu

Atom je koule z homogenně spojitě  
rozloženým kladným nábojem a „rozinkami“  
záporného náboje

# Atomové jádro

1911 – E. Rutherford,  
experiment Marsden a Geiger  
rozptyl  $\alpha$ -částic na Au-folii



# Rutherfordův model

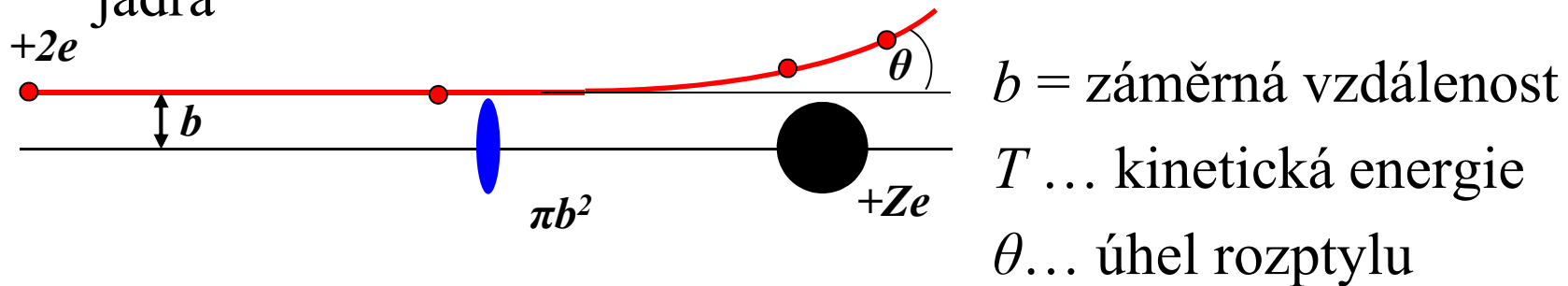
Určité množství  $\alpha$ -částic bylo rozptylováno o velké úhly až  $180^\circ$ , většina částic však procházela beze změny směru

→ představa atomu jako objektu s velmi malým hmotným jádrem a elektronovým obalem, opuštěn „pudinkový“ model

Rozptylování  $\alpha$ -částic záviselo na protonovém čísle  $Z$

# Rozptyl $\alpha$ -částic

Z rozptylových experimentů bylo možno odhadnout rozměr  
jádra



Úhel rozptylu  $\cot\left(\frac{1}{2}\theta\right) = \frac{4\pi\epsilon_0 T}{Ze^2} b$

Účinný průřez  $\pi b^2 =$  plocha ze které bude částice rozptýlena  
nejméně o úhel  $\theta$



# Odhad velikosti atomu

V okamžiku největšího přiblížení  $\alpha$ -částice a jádra je kinetická energie rovna potenciální energii elektrostatického působení  $\alpha$ -částice a jádra

$$T = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(Ze)(2e)}{r_0} \rightarrow r_0 = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 T}$$

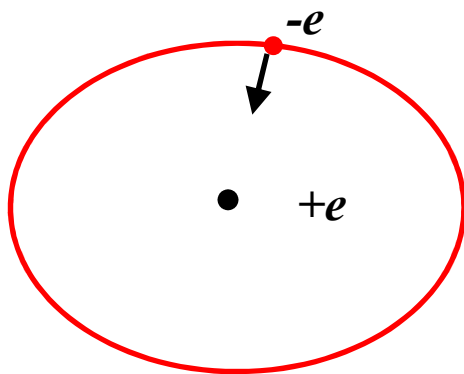
Pro  $T=7.7\text{MeV}$  je  $r_0=3.0 \cdot 10^{-14}\text{m}$

Zlato  $Z=79$

# Planetární model

Rutherford si představoval elektrony jako planety kroužící kolem jádra

Vodík



Dostředivá síla = elektrické síle

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \rightarrow v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 mr}}$$

Celková energie elektronu

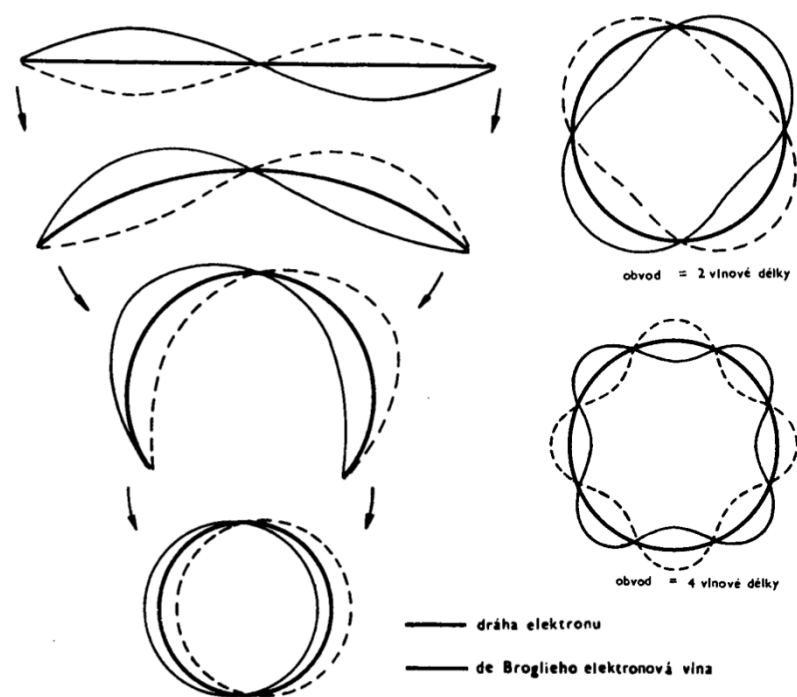
$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Pro vodík je  $E = -13.6\text{eV}$  vyjde  $r = 5.3 \cdot 10^{-11}\text{m}$

Elektron ovšem vyzařuje energii a brzy by se atom zhroutil!

# Bohrův model atomu

Elektron se pohybuje jako planeta kolem jádra, ale tak aby docházelo ke konstruktivní interferenci elektronu jako stojaté vlny



De Broglieho vlnová

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{e} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m}}$$

pro  $r = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{m}$

je  $\lambda = 33 \cdot 10^{-11} \text{m} \approx 2\pi r$

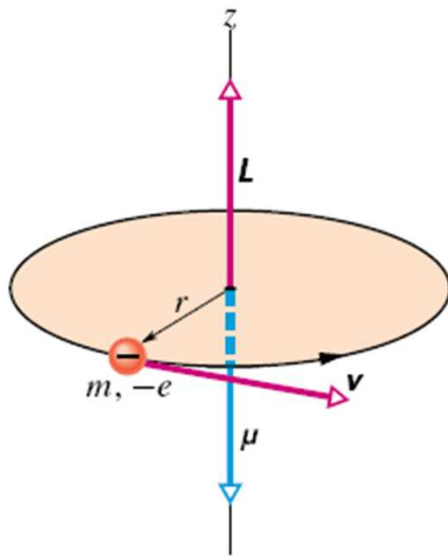
kvantování

$$2\pi r_n = n\lambda$$

# Bohrův model atomu

N.Bohr, 1913

kombinace klasického planetárního modelu  
s kvantovací podmínkou



Energie elektronu ( $Z=1$ )

$$E_P = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Kvantování momentu  
hybnosti (Planckova konstanta)

$$m_e v r = n \frac{h}{2\pi}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

# Bohrův model atomu

- Kvantované poloměry drah elektronů

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 h^2}{m_e \pi e^2} n^2 = a_0 n^2, a_0 = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

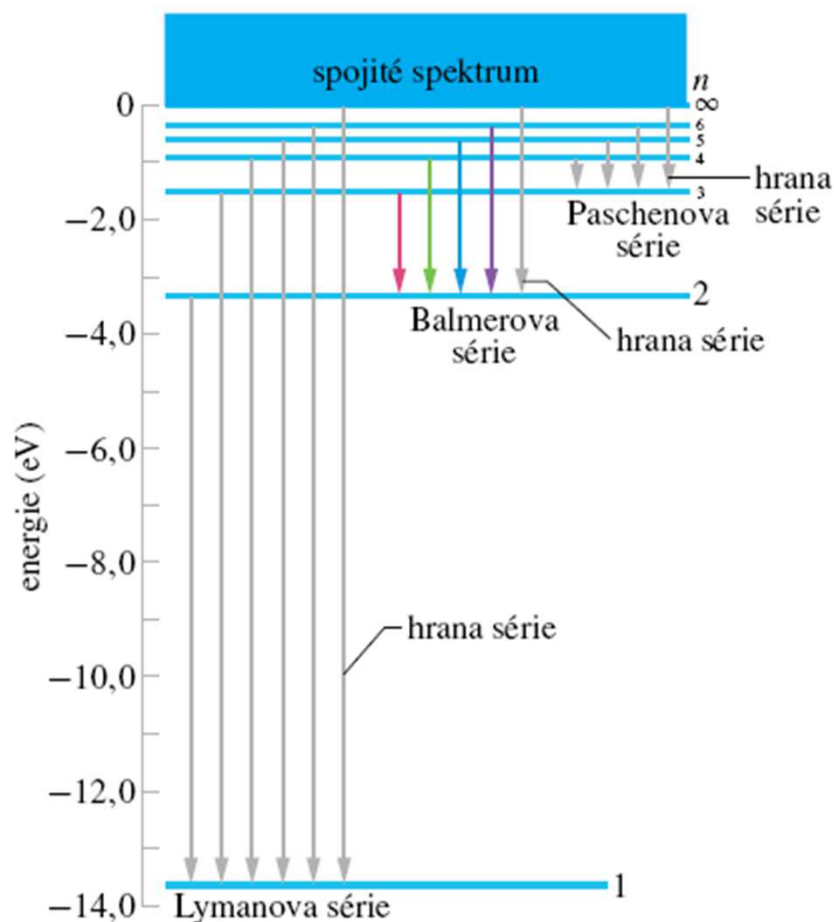
- Kvantované rychlosti elektronů

$$v_n = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} \frac{1}{n}$$

- Kvantované energie elektronů (hlavní kvantové číslo  $n$ )

$$E = E_K + E_P = -\frac{e^4 m_e}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

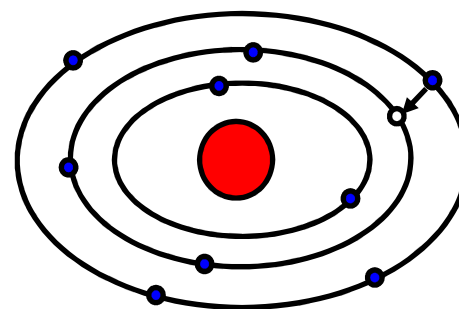
# Energetické hladiny elektronů pro vodíkový atom



Energie se s kvantovým  
číslem  $n$  zvětšují

$$E_n = -\frac{13.6eV}{n^2}$$

Vyzařované záření



$$E_f - E_c = \frac{hc}{\lambda}, \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} Js$$

# Spektrální čáry atomu vodíku

Vlnová délka spektrálních čar

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 ch^3} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Serie spektrálních čar – hrana serie ( $n_i \rightarrow \infty$ )

$n_f=1$  Lymanova serie (UV)

$n_f=2$  Balmerova serie (viditelné)

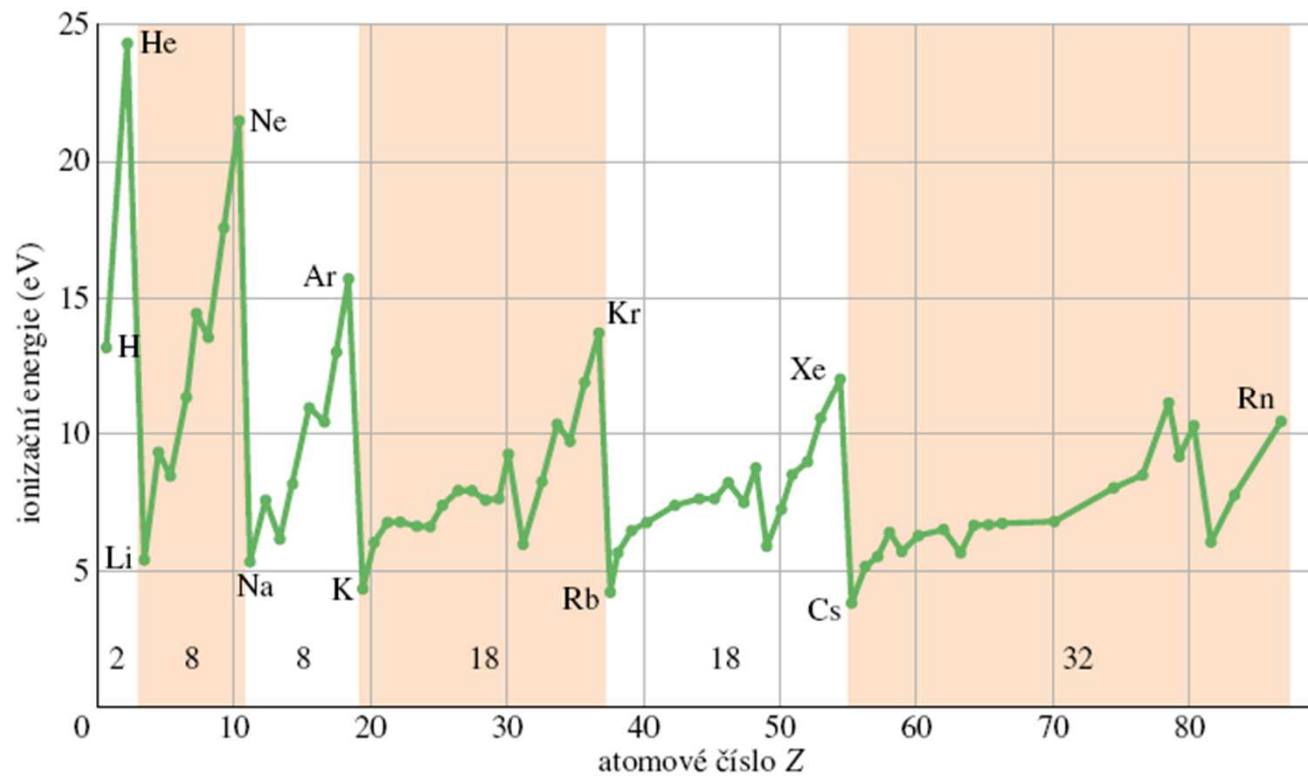
$n_f=3$  Paschenova serie (IČ)

$n_f=4$  Brackettova serie (IČ)

$n_f=5$  Pfundova serie (IČ)

# Ionizační energie

Energie potřebná k odejmutí nejslaběji vázaného elektronu v obalu





# Momenty hybnosti elektronu

- Orbitální (vedlejší kvantové číslo  $l$ )

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \quad \mu_{\text{orb},z} = -m_l\mu_B$$

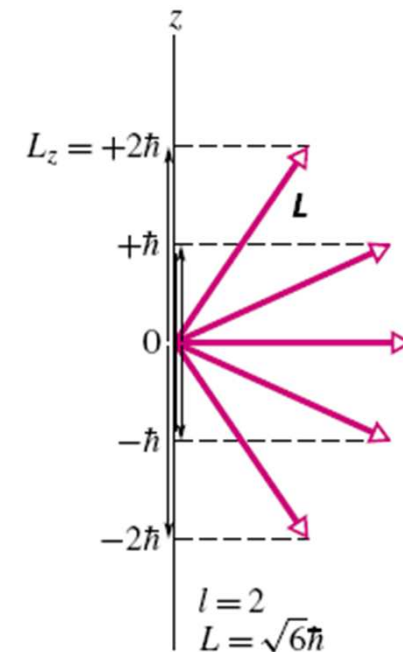
$$L_z = m_l\hbar$$

Bohrův magneton  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J}\cdot\text{T}^{-1}$

- Spinový

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} \quad \mu_{s,z} = -2m_s\mu_B$$

$$S_z = m_s\hbar$$



# Dovolené hodnoty kvantových čísel

## Stavy elektronu v atomu

KVANTOVÉ ČÍSLO	SYMBOL	DOVOLENÉ HODNOTY	VYJADŘUJE
hlavní	$n$	1, 2, 3, ...	vzdálenost od jádra
orbitální	$l$	0, 1, 2, 3, ..., $(n - 1)$	orbitální moment hybnosti (velikost)
magnetické orbitální	$m_l$	0, $\pm 1$ , $\pm 2$ , ..., $\pm l$	orbitální moment hybnosti ( $z$ -ová složka)
magnetické spinové	$m_s$	$\pm 1/2$	spinový moment hybnosti ( $z$ -ová složka)

## Číslování slupek a podslupek

Slupky 1,2,3,...

Podslupky s,p,d,f

# Obsazování elektronových hladin

Princip minima energie

Pořadí slupek

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, ...

Př.: hladiny v atomu draslíku  $_{19}\text{K}$

$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^1$

# Pauliho vylučovací princip Hundovo pravidlo

Pauliho vylučovací princip – žádné dva elektrony v atomu nemohou mít stejnou sadu kvantových čísel.

Hundovo pravidlo – podslupka se obsazuje elektrony nejprve se stejným spinem, při větším počtu elektronů se elektrony párují.

Nepřechodné prvky

Nepřechodné prvky

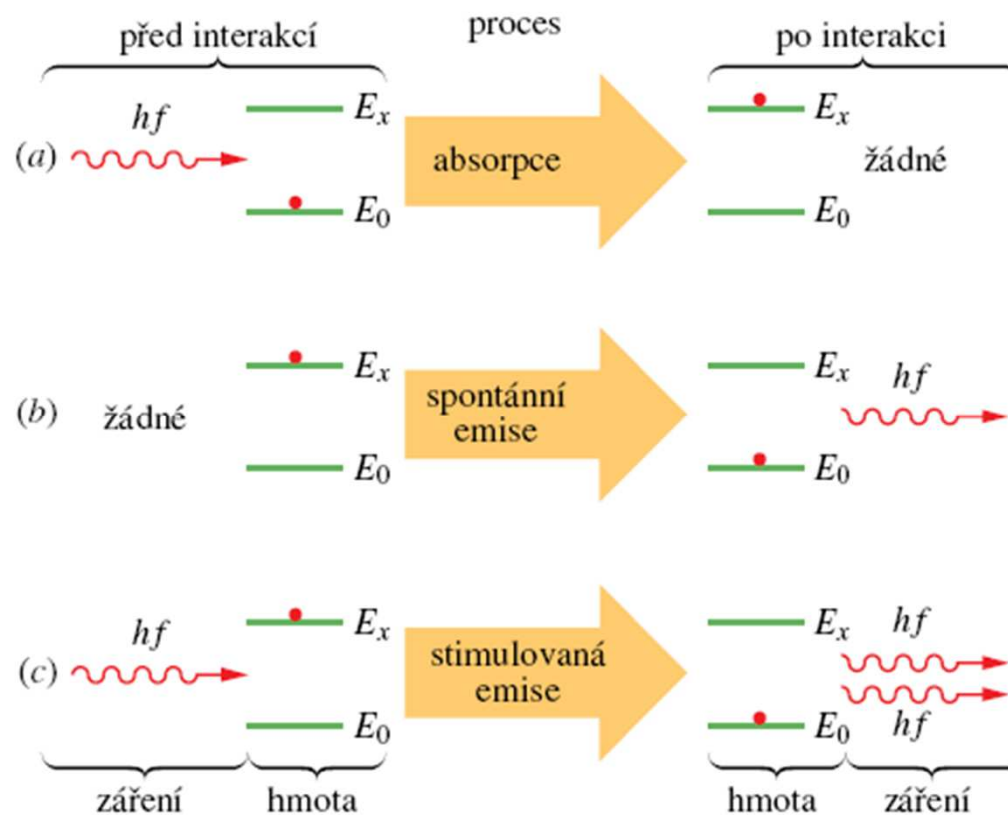
	1												18						
1	1												2						
	H																		He
	2												13	14	15	16	17		
2	3	4	Přechodné prvky (kovy)										5	6	7	8	9	10	
	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
3	11	12											13	14	15	16	17	18	
	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	55	56	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	87	88	89-103	104	105	106	107	108	109	110	111	112							
	Fr	Ra	†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt										

Vnitřně přechodné prvky (kovy)

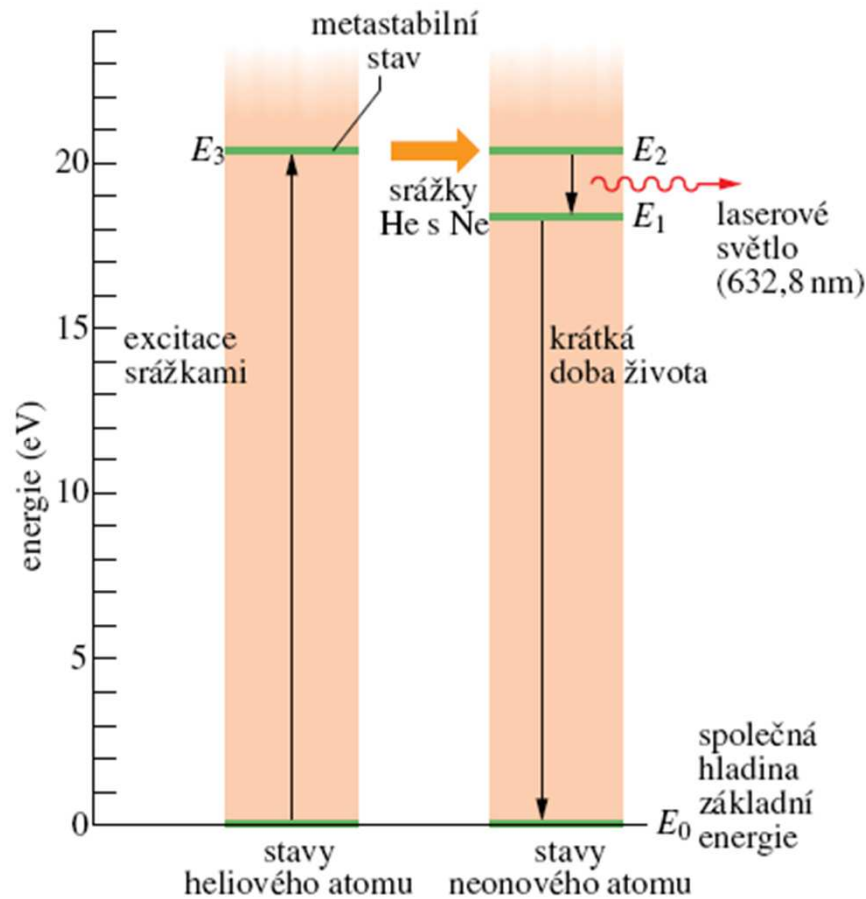
Lanthan a lanthanoidy *	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Aktinoidy †	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

# Absorpce, emise fotonu

## Obsazení elektronových hladin



# He-Ne laser



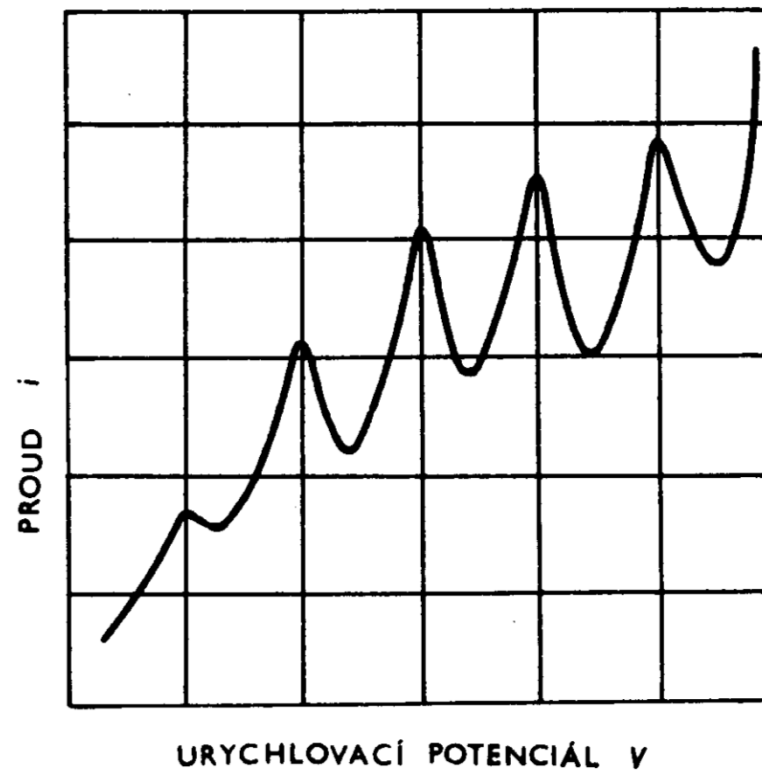
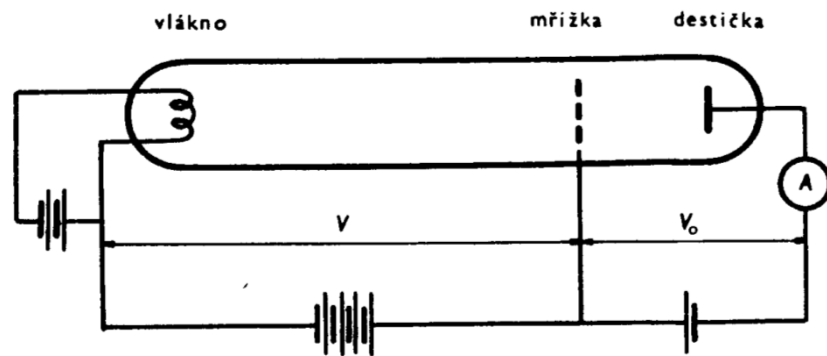
Stimulovaná  
emise elektronů

$$E_3 \approx E_2$$

Vzniklý foton má  
stejné vlastnosti  
jako stimulující

# Franckův – Hertzův pokus

1914 – J.Franck, G.Hertz, srážky urychlovaných elektronů s atomy plynů ve výbojce → pozorovány změny proudu





# Franckův – Hertzův pokus

Elektrony emitované ze žhavené katody se pružně srážejí s atomy plynu v baňce

Očekávání – se vzrůstem urychlujícího napětí se bude monotonně zvyšovat proud

Pozorování – proud se zvyšoval nepravidelně se zřetelnými poklesy!

Vysvětlení – při určitých hodnotách kinetické energie elektronu dochází k jeho absorpci v elektronovém obalu atomu plynu, excitaci elektronu a následnému vyzáření fotonu, tyto absorbované elektrony mají menší energii a proud poklesne

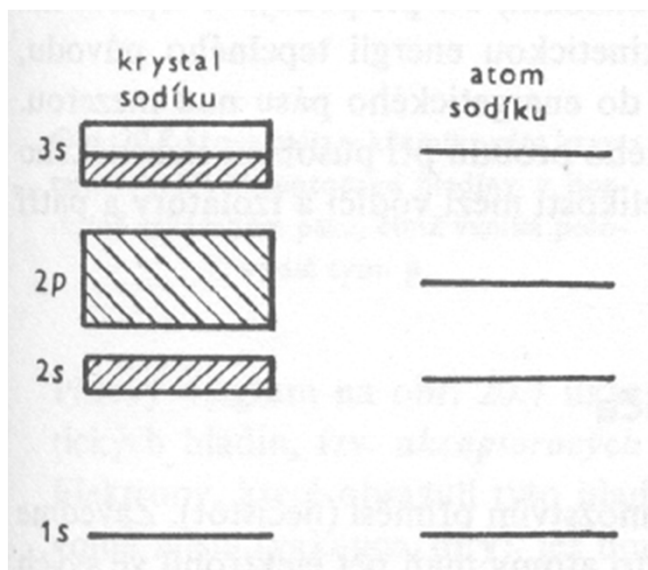
Př.: rtuť  $E = 4.9\text{eV}$  pro  $\lambda = 254\text{nm}$

# Pásová struktura energií elektronů

- Energie elektronů v atomech krystalu se překrývají – vznikají pásy
- Energetické pásy se mohou překrývat
- Zakázaný pás odděluje dva nepřekrývající se pásy
- Valenční a vodivostní pás energií

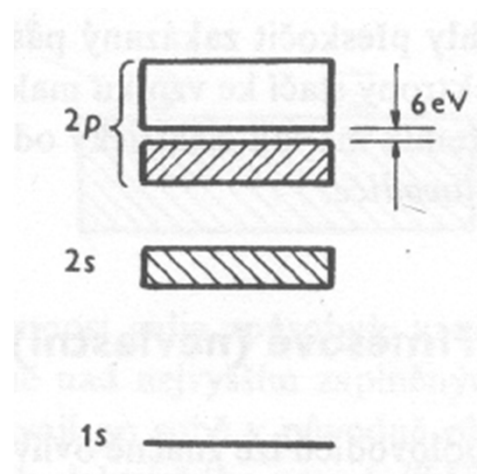
# Rozštěpení hladin energií elektronů

Sodík – vodič

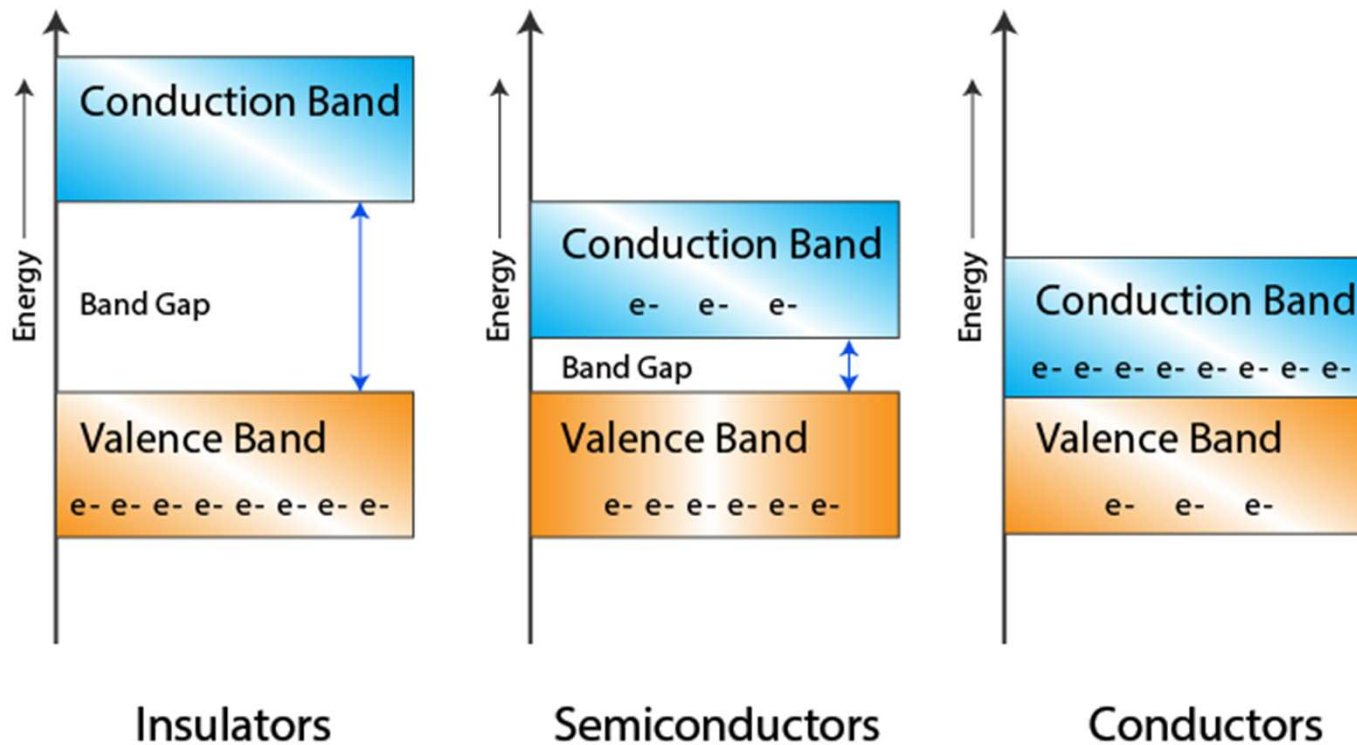


diamant - izolant

zakázaný pás 6eV



# Látky podle pásové struktury



# Chemická vazba atomů

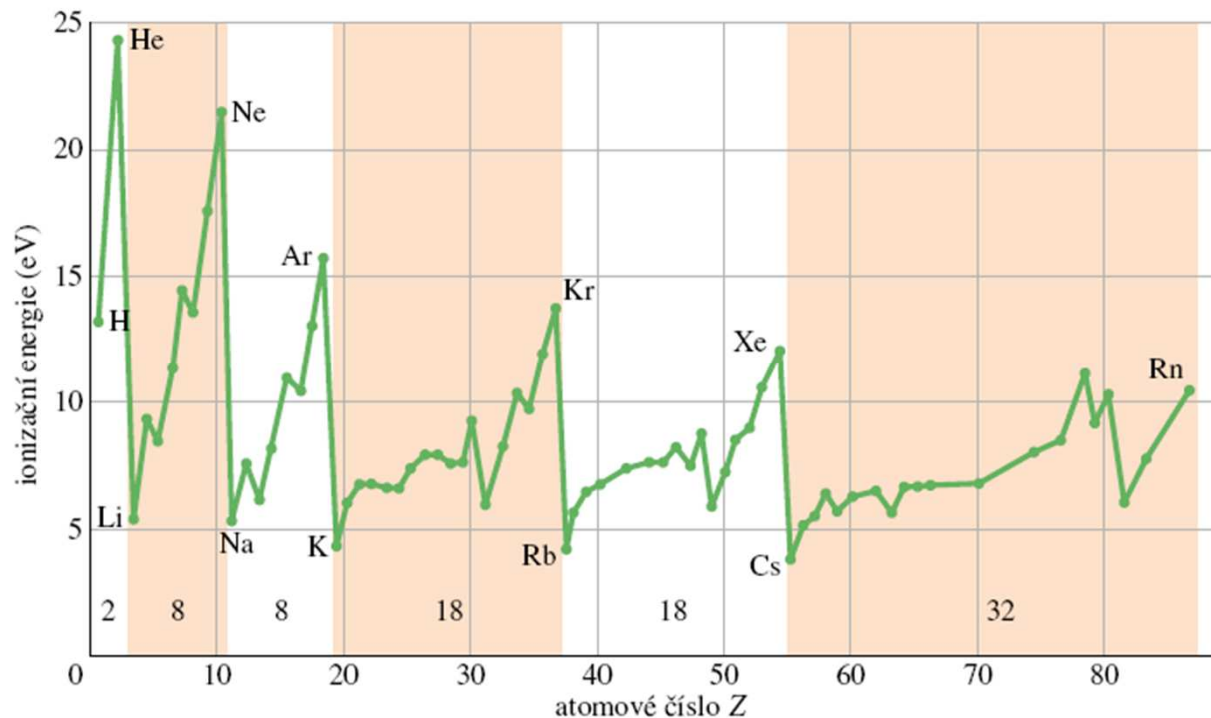
Nastane, pokud tím klesne celková energie soustavy atomů

Typy vazeb:

- Kovalentní vazba – jeden nebo více elektronů je společných oběma atomům
- Iontová vazba – jeden nebo více elektronů přejde z jednoho do druhého atomu, vzniklé ionty se přitahují elektrostaticky
- Kovová vazba – sdílení mnoha elektronů ve celém objemu látky
- Smíšené typy vazeb (Van der Waalsova, vodíkovými můstky)
- Vazba nevzniká např. kvůli Pauliho principu

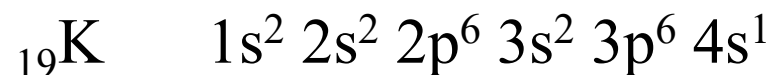
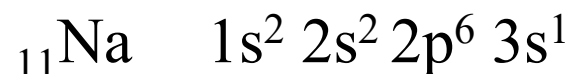
# Ionizační energie

Energie potřebná k odejmutí nejslaběji vázaného elektronu v obalu – míra toho, jak dobře „drží“ v atomu okrajové elektrony – uzavírání elektronových slupek



# Alkalické kovy

I. grupa Mendělejevovy tabulky – jeden elektron v neuzavřené slupce

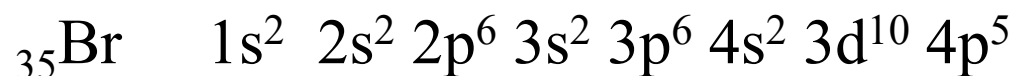
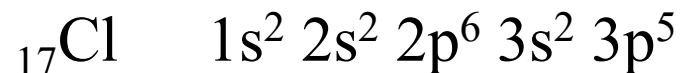
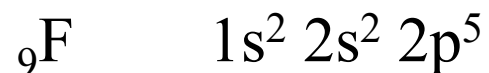


Vnitřní uzavřené slupky „stíní“ vnější elektron od nábojů jádra, ten je držen efektivně jen nábojem  $+e$ , k jeho oddělení je potřeba malé energie → malé hodnoty ionizační energie

Alkalické kovy snadno tvoří kladné jednomocné ionty a iontovou vazbu

# Halogeny

VII. grupa Mendělejevovy tabulky – jeden elektron chybí do uzavření slupky



Mají snahu doplnit si poslední neuzavřenou p-podslupku, vytvářejí záporně nabitě ionty a iontovou vazbu

LiF, LiCl, NaCl, NaF, KBr, KI, ...



# Elektronová afinita

Energie uvolněná přidáním elektronu k atomu prvku.  
Čím je afinita větší, tím je elektron pevněji vázán

F      3.45eV

Cl     3.61eV

Br     3.36eV

I      3.06eV

Např. v NaCl se ionty  $\text{Na}^+$  a  $\text{Cl}^-$  nepřibližují k sobě natolik, aby se překrývaly jejich elektronové slupky, vytváří se elektrický dipól

# Iontové krystaly

Např. NaCl – dvojice iontů vytváří dipól, kde přitažlivé síly uvnitř dipólu jsou větší než odpuzivé síly mezi sousedními dipóly

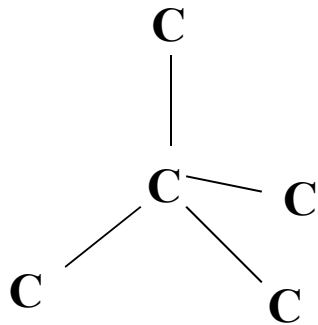
„zhroucení“ struktury brání Pauliho vylučovací princip, neboť při překryvu elektronových orbitalů by musel být některé elektrony excitovány do vyšších hladin, což by bránilo vzniku stabilní struktury

Iontové krystaly – tvrdé, ale křehké, vysoký bod tání, rozpustné v polárních rozpouštědlech ( $\text{H}_2\text{O}$ )

# Kovalentní krystaly

Vznikají překryvem elektronových orbitalů a sdílením elektronů mezi dvěma atomy, směrová vazba

Např. C (diamant), SiC, Si, Ge

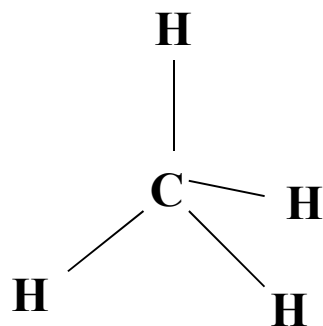


kovalentní krystaly jsou tvrdé,  
mají vysoký bod tání,  
nerozpustné v kapalinách

# Van der Waalsovy síly

Slabé vzájemné přitahování mezi atomy velmi krátkého dosahu, polární molekuly se slabě přitahují opačně nabitými konci

Tyto slabé síly způsobují např. kondenzaci plynu na kapalinu, vnitřní tření plynu, povrchové napětí



Molekulární krystaly mají nízký bod tání a varu, nízkou mechanickou pevnost

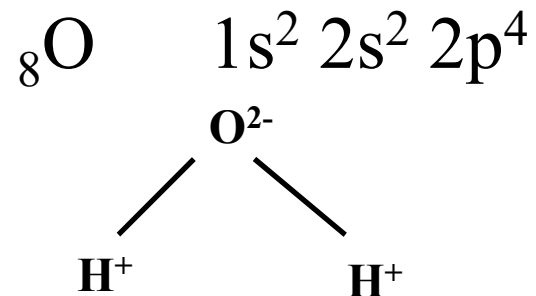
Např. metan  $\text{CH}_4$

# Vodíkové síly (můstky)

Např. H<sub>2</sub>O, čpavek NH<sub>3</sub>, fluorovodík HF

Vodíkový atom se slučuje s tak elektronegativními prvky, že „věnuje“ prakticky veškerý záporný náboj takovému atomu a zůstává téměř „holý“ proton

Vazba silně polární, anomálie vody



každá molekula vody tedy může vytvořit vodíkové vazby se 4 jinými molekulami vody

# Kovová vazba

Elektrony jsou sdíleny celým objemem krystalu  
„elektronový plyn“ volných elektronů

Kolektivní interakce elektronů v celém krystalu

Elektronové hladiny tvoří spojitý pás energií, to  
umožňuje absorpci libovolného fotonu a  
neprůhlednost kovu

Krystaly mají dobrou tepelnou a elektrickou  
vodivost, kujnost, neprůhlednost, lesklý povrch, ale  
menší tvrdost než iontové krystaly

# Uspořádání atomů

- Na krátkou vzdálenost (meziatomové síly, chemická vazba, skupenství)
- Na dlouhou vzdálenost (krystalická mřížka, amorfní látky)

Mezi uspořádáním krystalických a amorfních látek jsou kapalně krystalické s uspořádáním v 1D nebo 2D

- Nematické kapalně krystalické – uspořádání molekul v jednom směru
- Smektické kapalně krystalické – uspořádání molekul ve vrstvách
- Chirální, cholesterické kapalně krystalické – uspořádání do šroubovic

# Literatura

V prezentaci byly použity materiály  
z knih:

A.Beiser: Úvod do moderní fyziky, Academia Praha  
1975

Ch.Kittel: Úvod do fyziky pevných látek, Academia  
Praha 1985

HALLIDAY, D., RESNICK, R., WALKER, J.:  
Fyzika (část 5 – Moderní fyzika), Vutium, Brno  
2000