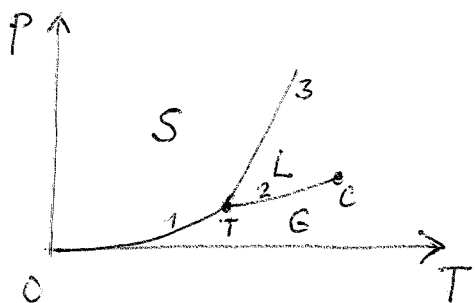


ZA'KLADNE POJMY

A. Kondenzovaná látka

maximální stabilitu vyplnění sloumami Ar při křivce T a křivce p experimentálně fakt:



3 Fáze:

identifikace { $S =$ tuhá fáze } kondenzovaná
 $L =$ kapalná fáze } fáze
 $G =$ plynná fáze

$T =$ trojový bod $T_T = 84K, p_T = 69 kPa$

$C =$ kritický bod $T_C = 151K, p_C = 4,9 MPa$

stavová rovnice: $p = p(p, T)$

chemický potenciál $\mu = \mu(p, T)$

Rovnovážná fáze:

Gibbsův potenciál

$$G(T, P, N) = N_\alpha \underset{\substack{\uparrow \\ \text{fáze } \alpha}}{\mu_\alpha(T, P)} + N_\beta \underset{\substack{\uparrow \\ \text{fáze } \beta}}{\mu_\beta(T, P)}$$

$$N_\alpha + N_\beta = N$$

minimum: $\frac{\partial G}{\partial N_\alpha} = \mu_\alpha(T, P) - \mu_\beta(T, P) \stackrel{!}{=} 0$

číslo 1, 2, 3: rovnováha mezi $\mu_\alpha(T, P) = \mu_\beta(T, P)$

bod T: $\mu_S(T, P) = \mu_L(T, P) = \mu_G(T, P)$

B. Spontánne narušenie symetrie

Hamiltonian (99% jadr-)

$$H = H_{kin}^{el} + H_{kin}^{ion} + H_{el-el} + H_{ion-ion} + H_{el-ion}$$

$$H_{kin}^{el} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \quad H_{kin}^{ion} = \sum_\alpha \frac{\vec{P}_\alpha^2}{2M_\alpha}$$

$$H_{el-el} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

$$M_\alpha = \text{hmotnosť } \alpha$$

$$H_{ion-ion} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|}$$

$$e Z_\alpha = \text{náboj iónu } \alpha$$

$$H_{el-ion} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i, \alpha} \frac{Z_\alpha}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|}$$

H je translačne invariantný (nemenný pri $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_i + \vec{\rho}$
 $\vec{R}_\alpha \rightarrow \vec{R}_\alpha + \vec{\rho}$)

H je rotácie invariantný (nemenný pri $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_i + \delta\vec{\varphi} \times \vec{r}_i$
 $\vec{R}_\alpha \rightarrow \vec{R}_\alpha + \delta\vec{\varphi} \times \vec{R}_\alpha$
 $\vec{P} \rightarrow \vec{P} + \delta\vec{\varphi} \times \vec{P}$)

Tekutiny (kapaliny a plyny) sú translačne aj rotácie invariantné.
 (t.j. sledujú hodnoty hustoty sú stále rovnaké)

Pevné látky nie sú translačne ani rotácie invariantné
 (sledujú hustoty sú modulované v priestore)

SPONTÁNNE NARUŠENIE SYMETRIE

Kryštály: invariantné voči diskretnej sade posunov a otočení

Skla: žiadne symetrie

C. Zakladni' veta: Symetria sa nemôže meniť spojite, ale iba skokom. (Bohr je, alebo nie je)

↓ dôsledok: prvá fáza je oddelená od druhá
fázovými prechodmi (čiar 1 = sublimácia
3 = topenie)

Čiara 2 sa končí v kritickom bode C

↓ existuje spojité dianie vo fázovom priestore spojitým
oblasti L, G

↓ Izopatiem a plyn, vzhľadom na to, nemôže existovať, obidva prípady,
keď obe koexistujú (l.j. na čiare 2)

D Zakladni' otázky

1. klasifikácia materiálov podľa namáhania symetrie
(vzhľadom na fázu o fázovom priestore)

2. skúmanie fyzikálnych vlastností fáz

E Zakladni' rešimý

de Broglieho (vlnová) dĺžka $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mT}}$

ρ = hustota častíc

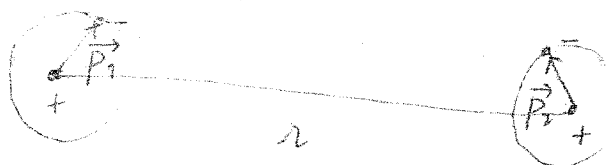
klasický režim: $\rho \lambda^3 \ll 1$ (malá hustota, ľahké častice,
vysoká teplota)

kvantový režim: $\rho \lambda^3 \gg 1$

5)

uplatňují se mostly sloučeniny jednoduché bez celkového náboje
a bez dipolového momentu, např. inorganické a některé organické
molekuly.

Näggelens ductin' påklad: sila medsi domi H alchami ota lero
od rebat (dipol'ing' moment alcham H
V tillkännom vare = C)



2 » Boden-pflanze
 feuchter rheinischer franken-
 wald zu hochst.

$\begin{array}{c} \text{long atom} \\ \swarrow \searrow \\ \text{fall. Nov.} \quad 100 \quad \dots \quad \text{long atom} \end{array}$

excitane' state: $|n m\rangle \rightarrow$ energy $\varepsilon_n + \varepsilon_m$

malá forma :

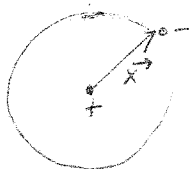
$$H' = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2}{r^3} - 3 \frac{\vec{p}_1 \cdot \vec{r} \vec{p}_2 \cdot \vec{r}}{r^5} \right]$$

dipol-dipolowa
tutakcia

Korekasi k energi total. Namun:

$$\delta E = \langle 00 | H' | 00 \rangle - \sum_{n, m} \frac{|\langle n, m | H' | 00 \rangle|^2}{E_n + E_m - 2E_0} + \dots$$

Other matrix elements operators dipole moment are written $\vec{p} = e\vec{X}$



$$\vec{p}_{nm} = \langle n | \vec{p} | m \rangle$$

$|n\rangle, |m\rangle =$ rötne Rang toho
Meth₂ also'm u

$$\vec{P}_{cc} = \langle c | \vec{r} | c \rangle = \int d^3x |\varphi_c(x)|^2 \vec{r} = 0$$

$\downarrow$
 f_1 $\rightarrow$ f_2

Priklad $\langle 00 | H' | 00 \rangle = 0$

Primer 2. rida:

$$\langle mm | H' | 00 \rangle = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\lambda^3} (\vec{p}_{m0} \cdot \vec{p}_{m0} - 3 \vec{p}_{m0} \cdot \hat{r} \vec{p}_{m0} \cdot \hat{r})$$

$\hat{r}$ = jednotkový vektor
v směru $\vec{r}$

$$\delta E = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0\lambda^3} \right)^2 \sum_{n \neq 0} \sum_{m \neq 0} \frac{1}{\epsilon_n + \epsilon_m - 2\epsilon_0} (\vec{p}_{n0} \cdot \vec{p}_{m0} - 3 \vec{p}_{n0} \cdot \hat{r} \vec{p}_{m0} \cdot \hat{r})^2$$

přibližná interakce, $\delta E \propto - \frac{1}{\lambda^6}$

řádový odhad vektorů: $\delta E \sim - \frac{1}{E_0} \left(\frac{e^2 q_B^2}{4\pi\epsilon_0\lambda^3} \right)^2$

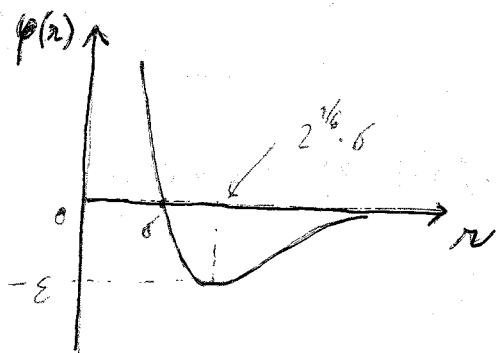
q_B = Bohrov-
potenciál

E_0 = energie 1. stavu

pro malé vzdálenosti: odpovídá interakci

(Pauliho vylučovací princip) $\rightarrow$ fenomenologická formula (Lennard-Jones):

$$\varphi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$



σ = charakter. dl. Heu

ϵ = charakter. energie

Príklad: kyslíky interakce plynné

parametry ϵ, σ můžeme určit z tabulky vlastností plynné

	He	Ne	Ar	Kr	Xe
ϵ (eV)	$8,6 \cdot 10^{-4}$	0,0037	0,0104	0,0104	0,02
σ (Å)	2,56	2,74	3,40	3,65	3,98