

Atomová fyzika a elektronová struktura látek  
**Errata et corrigenda**

- str. 22 - ve vzorci 1.4 má být správně

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_{L\alpha}} + \frac{1}{\lambda_{H\alpha}}$$

- str. 37 - první věta má být správně „...zákon zachování momentu hybnosti. Moment hybnosti...“

- str. 37 - vzorec 1.9 má být správně (chybné znaménko u horní meze integrace)

$$2m_\alpha v \sin \frac{\theta}{2} = \int_{-\frac{\pi-\theta}{2}}^{\frac{\pi-\theta}{2}} \frac{r^2}{vb} F(r) \cos \varphi d\varphi.$$

- str. 57 - vzorec 1.57 má být správně (ve jmenovateli nemá být  $\pi^2$ , ale jen  $\pi$ )

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

- str. 69 - vzorec na konci stránky má být správně

$$v_{2p} = \frac{2\hbar}{m_e r_{2p}} = 1,09 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}.$$

- str. 74 - vztah 1.97 má být správně

$$\vec{\mu}_s = \gamma_s \vec{S} = -\frac{e}{m_e} \vec{S},$$

kde  $\gamma_s = -\frac{e}{m_e}$  značí gyromagnetický poměr pro spin určený ze Sternova–Gerlachova experimentu.

- str. 75 - vztah 1.101 má být správně

$$H = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \right) + \sum_{i=1}^N \left( -\frac{Ze'^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e'^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|},$$

- str. 76 - druhý výraz ve vztahu 1.104 má být (chybí druhá mocnina)

$$\varrho = -e \sum_j |\Psi(\vec{r}_j, \sigma_j)|^2$$

- str. 80 - v obrázku 1.36 má být správně 4p slupka

- str. 87 - vztah 1.120 má být správně

$$|L - S| \leq J \leq L + S$$

- str. 89 - věta pod obrázkem 1.43 má být „Celkový moment hybnosti  $\vec{J}$  je dán *vektorovým* součtem  $\vec{L}$  a  $\vec{S}$  a splňuje...“
- str. 89 - v rámečku má být správně

$$|L_1 - L_2| \leq L \leq L_1 + L_2$$

- str. 90 - v textu mezi vztahy 1.123 a 1.124 není nad symbolem magnetického momentu  $\mu$  zakreslena šipka značící vektorovou veličinu, správně má být  $\vec{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{L} + 2\vec{S})$
- str. 90 - na pravé straně vztahu 1.124 chybí  $J_z$ , tj. správně má být

$$\mu_z = \mu_J \frac{\vec{J} \cdot \vec{B}}{|\vec{J}|B} = \mu_J \frac{J_z}{|\vec{J}|} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \frac{(\vec{L} + 2\vec{S})(\vec{L} + \vec{S})}{|\vec{J}|^2} J_z$$

- str. 92 - v řešení příkladu má být správně uvedeno (za vzorcem 1.128) „Pro term  ${}^2P_{3/2}$  máme  $J=\frac{3}{2}$  a pro  ${}^2P_{1/2}\dots$ “
- str. 93 - v řádku pod (1.136) má být správně „tj.,  $\Delta E = -\frac{E^2}{hc} \Delta \lambda = -7,85 \times 10^{-5} \text{ eV.}$ “
- str. 99 - ke konci prvního odstavce kapitoly 2.1 Popis molekul má být „V případě molekuly vody  $\text{H}_2\text{O}$  bychom se dozvěděli, že...“
- str. 112 - ve schématu na obrázku 2.13 má být text ve druhém sloupci v předposledním rozhodovacím rovnoběžníku správně „obsahuje roviny  $n\sigma_v$ ?“
- str. 122 - v posledním vztahu na této straně nemá být druhá mocnica u kvantového čísla  $J$ :

$$L_x^2 + L_y^2 = J(J+1)\hbar^2 - K^2\hbar^2$$

- str. 124 - v poslední větě má být správně uvedeno „ve tvaru sférického vlčka“ nikoliv symetrického
- str. 132-133 - vztahy 2.52 a 2.53 mají být správně

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I} ((J+1)(J+2) - J(J+1)) = \\ &= \hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{I}(J+1). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I} ((J-1)J - J(J+1)) = \\ &= \hbar\omega_0 - \frac{\hbar^2}{I}J. \end{aligned}$$

- str. 136 - vzorec 2.59 má být správně

$$m\ddot{x} = qE - kx - B\dot{x}$$

- str. 140 - řádek pod vztahem 2.71 má být správně „Protože platí  $R \sim R_A \sim R_B \gg r$  můžeme psát“
- str. 143 - poslední rovnice na stránce má být správně

$$\varepsilon_v = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

- str. 143 - první řádek rovnice 2.99 má být správně

$$\langle U \rangle = \frac{1}{Z_T} \sum E_T e^{-\beta E_T} + \frac{1}{Z_r} \sum \varepsilon_r e^{-\beta \varepsilon_r} + \frac{1}{Z_v} \sum \varepsilon_v e^{-\beta \varepsilon_v}$$

- str. 144 - ve vztahu (2.91) probíhá sumace přes J,

$$Z_r = \sum_{J=0}^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2}{2J} J(J+1)}$$

- str. 145 - ve vztahu (2.99) je omylem dvakrát uveden člen pro rotace, chybí tak vibrační příspěvek,

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \frac{1}{Z_T} \sum E_T e^{-\beta E_T} + \frac{1}{Z_r} \sum \varepsilon_r e^{-\beta \varepsilon_r} + \frac{1}{Z_v} \sum \varepsilon_v e^{-\beta \varepsilon_v} \\ \langle U \rangle &= \langle E_T \rangle + \langle E_r \rangle + \langle E_v \rangle \end{aligned}$$

- str. 161 - v tabulce 3.2 má být u hexagonální soustavy správně uvedeno

<b>soustava</b>	<b>mřížové parametry</b>	<b>minimální symetrie</b>
hexagonální	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	jedna $C_6$ nebo $S_6$

- str. 170 - řádek pod vztahem 3.8 má být správně „... kde  $c_i = e_{i,\vec{q}}$  a  $c_k = q_k/q$  jsou směrové kosiny.“
- str. 174 - seznam operací symetrie 3.21 má být správně

$$C_2^1, \sigma_1, \sigma_2, E.$$

- str. 176 - v popisku tabulky 3.5 je rozpustnost uvedena v garmech nikoliv v miligramech
- str. 181 - na stránce je chybně uvedena rychlosť rústu krystalu Czochralského metodou (čtvrtý řádek zdola). Správně má být „(rychlosť  $\approx mm/hod$ )“
- str. 192 - v řešení ukázkového příkladu je má být správně uvedeno „jmenovatel“ místo „čitatel“

- str. 193 - řešení ukázkového příkladu (hexagonální mříž) má být správně takto (aby bylo v souladu s obrázkem 3.29):

**Řešení:** Budeme postupovat jako v předchozím příkladě. Vektory  $\vec{a}_i$  přímé hexagonální mříže mají v kartézských souřadnicích tvar

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= (a, 0, 0) \\ \vec{a}_2 &= \left( -\frac{1}{2}a, -\frac{\sqrt{3}}{2}a, 0 \right) \\ \vec{a}_3 &= (0, 0, c).\end{aligned}$$

Jmenovatel ve vztazích 3.52 má hodnotu,

$$\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = (a, 0, 0) \cdot \left( \frac{-\sqrt{3}}{2}ac, \frac{ac}{2}, 0 \right) = -\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c,$$

která odpovídá (až na znaménko) objemu elementární buňky. Dosazením vektorů přímé mříže do rovnic 3.52 získáme vektory reciproké elementární buňky,

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a^2c} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0 \right) \\ \vec{b}_2 &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a^2c} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} (0, -1, 0) \\ \vec{b}_3 &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a^2c} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{c} (0, 0, 1).\end{aligned}$$

- str. 194 - na obrázku 3.29 jsou prohozena označení vektorů  $\vec{b}_1$  a  $\vec{b}_2$
- str. 204 - pod vzorcem pro  $\cos \alpha$  má být správně  $d_{hkl} = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$
- str. 227 - ve vztahu 3.89 chybí znak integrálu, správně má být

$$B(\vec{r}, t) = \frac{1}{\Omega} \int \left( f(\vec{r}_1, t) f(\vec{r}_1 + \vec{r}, t) - \bar{f}^2 \right) d^3 \vec{r}_1.$$

- str. 240 - vzorec pro  $E'_e$  má být (vztah 4.5)

$$E'_e = c \sqrt{p_e'^2 + m_e^2 c^2}$$

- str. 241 - první rovnice za textem „Rovnice 4.6 si upravíme“ má být

$$E'_e = E + E_e - E'$$

- str. 245 - ve vztahu (4.20) chybí druhá mocnica u  $m_0$ ,

$$u_g = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{\sqrt{m_0^2 + \frac{p^2}{c^2}}} = \frac{p}{m} = v$$

- str. 262 - věta před vztahem 4.31 má být správně „...za použití de Broglieova vztahu  $p = h/\lambda$ “

- str. 276 - Zadání čtvrté úlohy k opakování má být:  
Jakou vlnovou délku má jádro  ${}^7_3\text{Li}$ , letí-li rychlostí  $35 \text{ km.s}^{-1}$ ?
- str. 280 - vztah 5.5 má být správně

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \hbar \omega_E \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}} - 1} \right)$$

- str. 280 - text po rámečkem - správně má být „Trojka v 5.6 ...“ a „...je měrné teplo jednoho molu rovno  $C_V = 3N_A k_B = 3R, \dots$ “
- str. 282 - úprava vztahu pro  $\omega^2$  nad výrazem (5.12) má správně být

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{K}{M} \left( 2 - e^{-ika} - e^{ika} \right) \\ &= 2 \frac{K}{M} (1 - \cos ka) \\ &= 4 \frac{K}{M} \sin^2 \frac{ka}{2}, \end{aligned}$$

- str. 283 - vzorec 5.13 má být správně

$$\omega(k) = 2 \sqrt{\frac{1}{M}} \sqrt{\sum_j K_j \sin^2 \frac{jka}{2}}$$

- str. 283 - v druhém odstavci kapitoly 5.2.2 má být správně uvedeno „V polovině délky spojnic vedeme přímky kolmé na tyto spojnice (roviny ve 3D).“
- str. 302 - vztah 5.66 má správně být

$$\begin{aligned} C_V(T \rightarrow 0) &= 9N_A k_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \\ &= 9N_A k_B \frac{4\pi^4}{15} \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3. \end{aligned}$$

- str. 304 - ve vztahu 5.67 chybí na prvním řádku sumace přes  $n$ ,

$$I(\vec{q}) \sim \langle F(\vec{q}) F^*(\vec{q}) \rangle = \left\langle \sum_m f_m(q) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_m + \vec{u}_m)} \sum_n f_n^*(q) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_n + \vec{u}_n)} \right\rangle$$

- str. 307 - v popisku obrázku 5.18 má být správně uvedeno „Při výpočtu  $B_{iso}$  byly použity hodnoty  $\Theta_{Al} = 390 \text{ K}$  a  $\Theta_{Si} = 692 \text{ K}$ .“
- str. 310 - ve vztahu 5.84 má být ve druhém členu  $k_B^2$ ,

$$\langle E \rangle = k_B T + \frac{15q^2}{16c^3} k_B^2 T^2.$$

- str. 312 - vzorec u příkladu na určení teploty tání stříbra má být správně

$$T_t = \frac{(0.15)^2}{4} \frac{Ea_{Ag}^3}{k_B} \approx 1225 \text{ K}.$$

- str. 320 - text pod nerovnostmi energie  $E_s$  - správně má být „Podle 6.1 nemusí vazba mezi atomy vůbec vzniknout. . .“
- str. 321 - na prvním řádku má být správně uvedeno „alkalické kovy“ nikoliv „prvky alkalických zemin“
- str. 327 - vztah 6.4 má být správně

$$\begin{aligned} H_{H_2} = & -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2 + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \left( -\frac{1}{|\vec{R}_A - \vec{r}_1|} - \frac{1}{|\vec{R}_B - \vec{r}_2|} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{|\vec{R}_A - \vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{R}_B - \vec{r}_1|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \frac{1}{R} \right) \end{aligned}$$

a vztah 6.5 má být

$$\Psi_{H_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_A(\vec{r}_1)\Psi_B(\vec{r}_2).$$

- str. 327 - na pátém řádku druhého odstavce odspodu stránky má být správně „. . . odpovídá vzdálenosti atomů  $R_{min} = 0,77 \text{ \AA}$ , což je blízko. . .“
- str. 333 - vztah 6.15 má správně být

$$N_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S(R))}},$$

- str. 335 - rovnice 6.20 má být správně

$$e^{-\frac{|\vec{r}-\frac{1}{2}\vec{R}|}{a_0}} e^{-\frac{|\vec{r}+\frac{1}{2}\vec{R}|}{a_0}} = e^{-\frac{R(\mu-\nu)}{2a_0}} e^{-\frac{R(\mu+\nu)}{2a_0}} = e^{-\frac{\mu R}{a_0}}. \quad (1)$$

- str. 337 - ve vztažích 6.29 a 6.30 má správně  $R/a_0$  místo  $R/a$
- str. 338 - výpočet výrazu pro  $H_X$  (vztah 6.33) má správně být

$$\begin{aligned} H_X = & \frac{1}{\pi a_0^3} \int d\vec{r}^3 e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{R}_A|}{a_0}} \frac{e'^2}{|\vec{r}-\vec{R}_A|} e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{R}_B|}{a_0}} \\ = & \frac{1}{\pi a_0^3} \frac{R^3}{8} \int_1^\infty d\mu \int_{-1}^1 d\nu \int_0^{2\pi} d\varphi (\mu^2 - \nu^2) e^{-R/2a_0(\mu-\nu)} \times \\ & \times \frac{e'^2}{R/2(\mu-\nu)} e^{-R/2a_0(\mu+\nu)} = \\ = & \frac{R^2 e'^2}{2a_0^3} \int_1^\infty d\mu \int_{-1}^1 d\nu (\mu + \nu) e^{-R\mu/a_0} = \\ = & \frac{e'^2}{a_0} \left( 1 + \frac{R}{a_0} \right) e^{-R/a_0}. \end{aligned}$$

- str. 340 - výsledný tvar vlnové funkce  $\Psi$  má být

$$\Psi = \psi\chi = \begin{cases} \psi_A\chi_S = \psi_A\chi_{\uparrow\uparrow} \\ \psi_S\chi_A = \psi_S\chi_{\uparrow\downarrow}, \end{cases}$$

- str. 343 - rovnice 6.40-6.42 mají být správně

$$\begin{aligned}\psi_{sp^2,1} &= a_s\psi_{2s} + a_{pz}\psi_{2p_z} + a_{px}\psi_{2p_x} \\ \psi_{sp^2,2} &= b_s\psi_{2s} + b_{pz}\psi_{2p_z} + b_{px}\psi_{2p_x} \\ \psi_{sp^2,3} &= c_s\psi_{2s} + c_{pz}\psi_{2p_z} + c_{px}\psi_{2p_x}.\end{aligned}$$

- str. 344 - ve vztahu 6.44 chybí znak \* u  $\psi_{sp^2,i}$ ,

$$\int \psi_{sp^2,i}^* \psi_{sp^2,j} d\vec{r} = 0$$

- str. 356 - vztah 6.88 má správně být

$$C_{el} = g(E_F) \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = g(E_F) \int_0^\infty (E - E_F) \frac{\partial f_{FD}(E)}{\partial T} dE,$$

- str. 356 - Řádek pod vztahem 6.90 má být správně „Na obrázku 6.26 jsou zobrazeny naměřené teplotní závislosti měrné tepelné kapacity pro tři kovy – měď, zlato a slitinu LuNiAl.“
- str. 357 - legenda u obrázku 6.26 - třetí položka má být Cu
- str. 373 - vzorec 6.137 má být správně

$$\lambda_{k+G} - E = 0 \quad E = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \vec{k} + \vec{G} \right)^2,$$

- str. 408 - jsou prohozeny hodnoty redukované a neredukované Planckovy konstanty