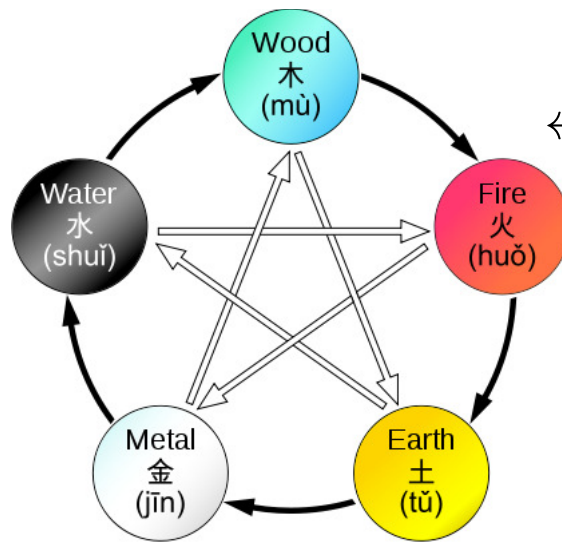
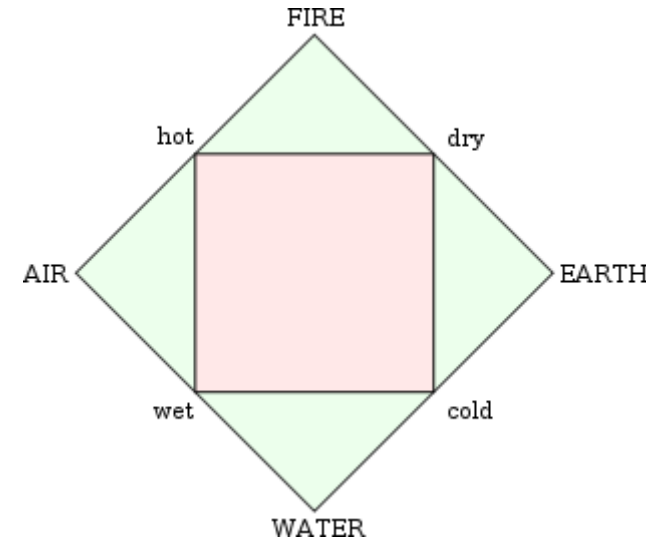


Leukippos, Demokritos, Epikuros:

- atomy železa jsou pevné a tvrdé a mají háčky
- vodní atomy jsou hladké a kluzké
- atomy soli jsou ostré a špičaté
- atomy vzduchu jsou lehké, pohyblivé, všepřonikající

Aristoteles: 2000 let vlády 4 živlů (země, voda, vzduch, oheň); ether



→ generating interaction
⇨ overcoming interaction

← ← **Čína:** 5 živlů (země tchu, kov ťin, voda šuej, dřevo mu, oheň chuo)

credit: obrázky Wikipedia

(17. stol.) R. Descartes – atomy s háčky

I. Newton: korpuskulární teorie světla

(1738) Daniel Bernoulli: Hydrodynamica – 1. myšlenky kinetické teorie plynů

(1803) J. Dalton

⊙ Hydrogen

⊖ Nitrogen

● Carbon

○ Oxygen

⊕ Sulphur

⊗ Phosphorus

⊙ Alumina

⊖ Soda

⊖ Potash

⊙ Copper

⊖ Lead

⊙⊙ Water

⊙⊖ Ammonia

⊙● Olefiant gas

○● Carbonic oxide

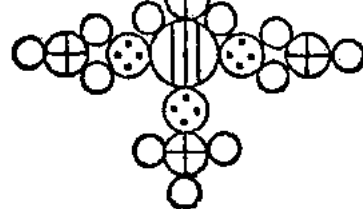
○●○ Carbonic acid

○
⊕
○

Sulphuric acid

○
⊕
⊙
○
⊕
○

Potash alum



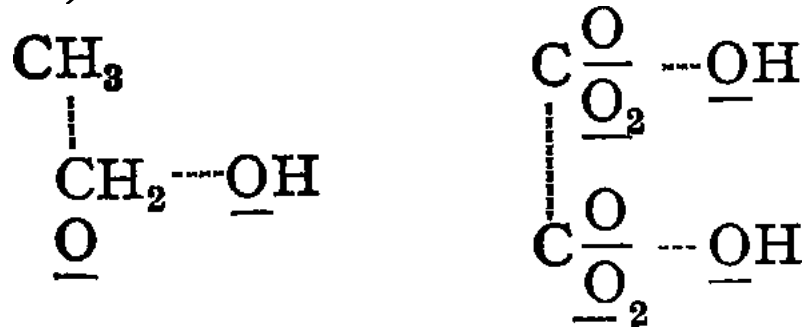
(17. stol.) flogiston

Christian Huygens: vlnová teorie světla

(1778) Antoine-Laurent Lavoisier – kyslík

(18. stol.) fluidum elektřiny (B. Franklin), tepla (Joseph Black)

(1856) Archibald Couper:



(1860–1865) August Wilhelm von Hofmann – kuličkové (stick-and-ball) modely (dodnes se zachovaly barvy) → →

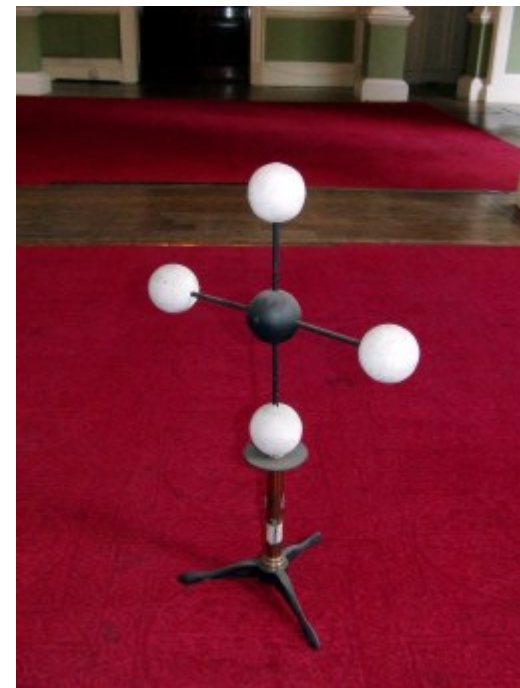
(1859) Maxwell – rozložení rychlostí v plynu

(1865) Gay-Lussac, Loschmidt – počet atomů v jednotce objemu plynu, Avogadro (na mol)

Ludwig Boltzmann, Max Planck, Rudolf Clausius, Willard Gibbs

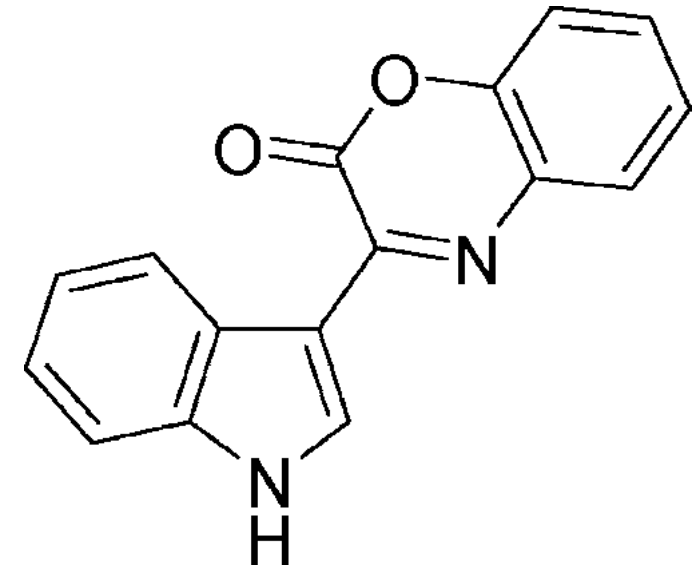
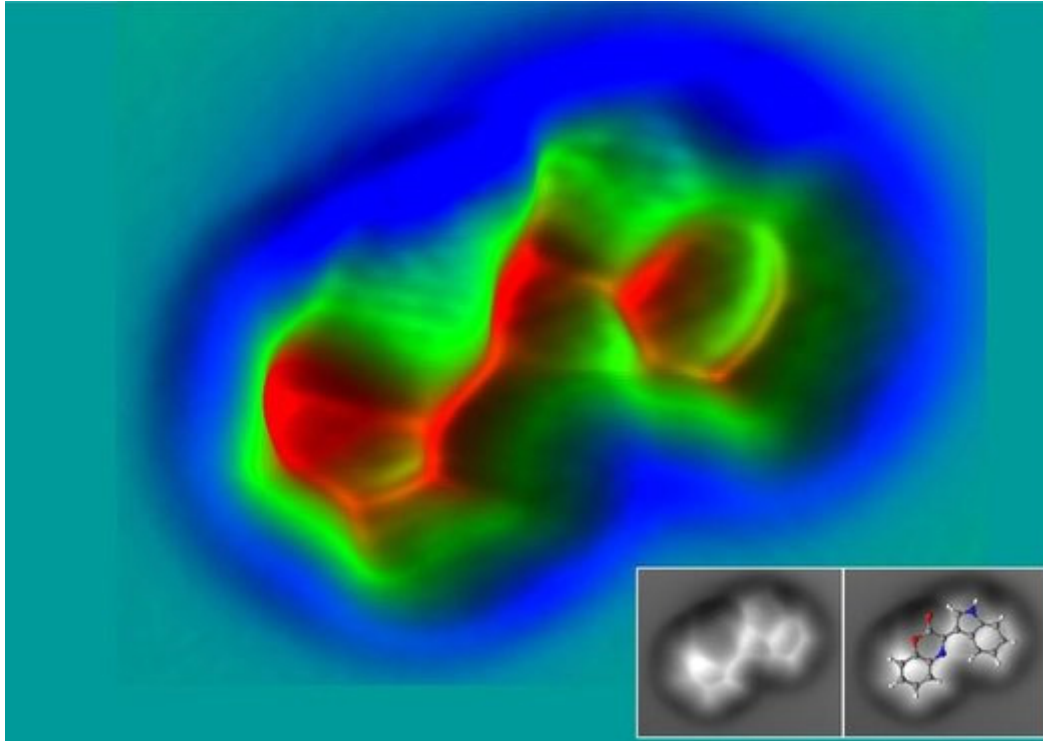
(zač. 19. stol.) vlnová teorie světla (Fresnel, Maxwell, Young)

(konec 19. stol.) Maxwellovy rovnice, ether



methan

Ernst Mach – positivismus: „zákony vždy obsahují méně než fakta“



Cephalandole A / AFM

credit: IBM Research Zurich, Nature News via www.popsci.com

Ale:

představa atomů jako kuliček přestává platit za velmi nízkých teplot

(1877) Boltzmann – diskrétní energie

(1900) Max Planck – záření černého tělesa

(1905) A. Einstein – difuze, fotoefekt

(1913) N. Bohr – semiklasický model atomu

A. Einstein: teorie relativity (kontinuum!)

Kvantová teorie:

(1924) Luis de Broglie – „vlny hmoty“

(1925) W. Heisenberg, M. Born – maticová mechanika

E. Schrödinger – vlnová mechanika

(1927) W. Heisenberg – princip neurčitosti

Kvantová teorie pole: Dirac, Feynman, Pauli...

Kvantová chemie:

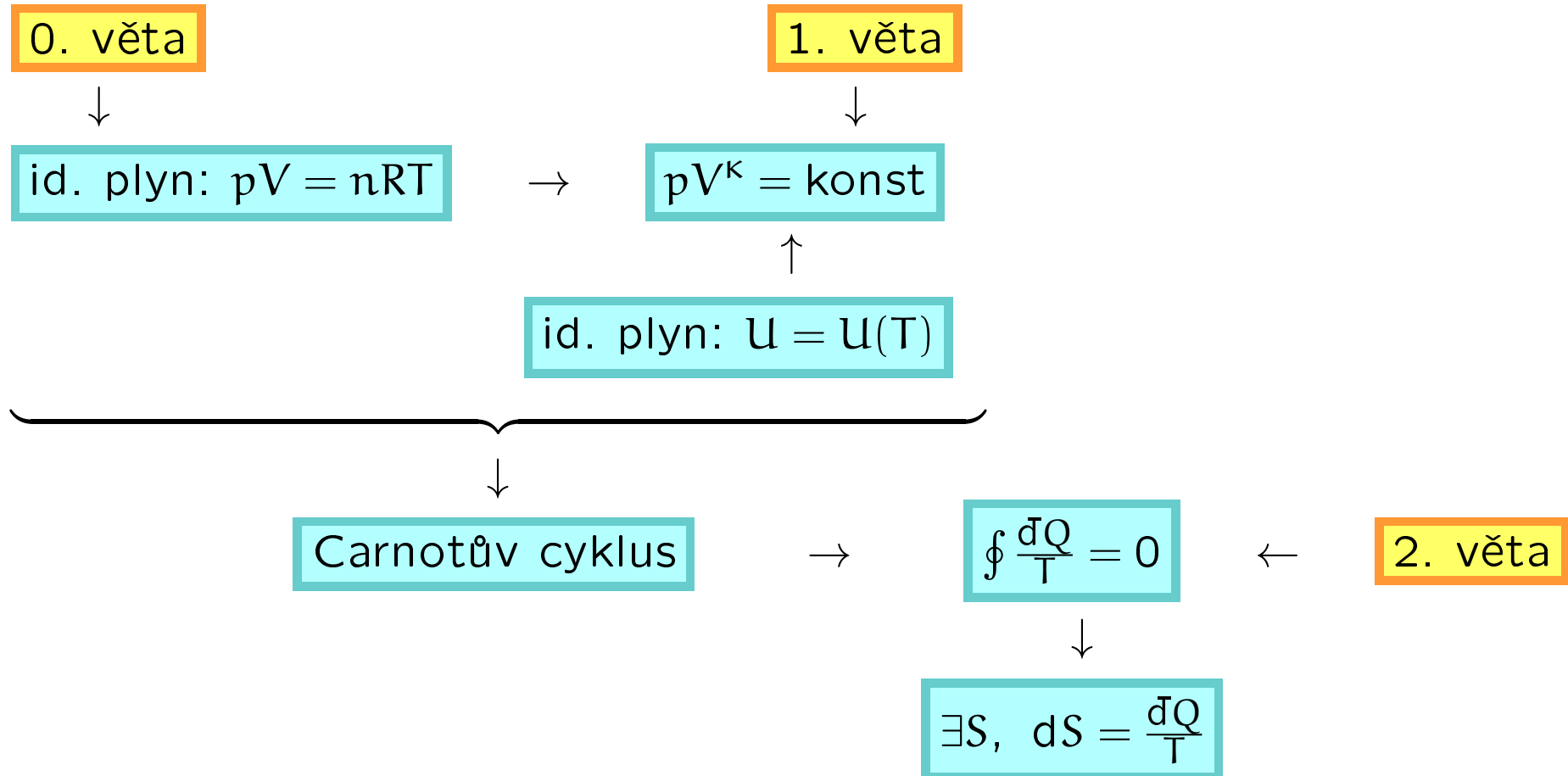
(1927) Heitler, London: H_2

(1928) L. Pauling ...

- Systém je popsán vektorem $|\psi\rangle$ v jistém separabilním komplexním Hilbertově prostoru \mathcal{H} (obecněji maticí hustoty)
- Experimentální zařízení je reprezentováno filtrem, $|\psi'\rangle = F|\psi\rangle$
- Symetrie jsou popsány unitárním nebo antiunitárním operátorem
- Měřitelné veličině odpovídá samosdružený (self-adjungovaný) operátor S , střední výsledek měření je $\langle\psi|S|\psi\rangle$

- Kodaňská interpretace:
 - Akcentuje x -reprezentaci ($\mathcal{H} = \mathcal{L}_2$)
 - Pravděpodobnostní přístup (Max Born)
 - Heisenbergův princip neurčitosti
 - Princip komplementarity (dualismus vlna–částice, Niels Bohr)
 - Princip korespondence (Bohr, Heisenberg)
 - Měřicí přístroj je klasické zařízení
 - Kolaps vlnové funkce
- Paralelní světy (Hugh Everett)
- Skryté parametry
- Shut up and calculate! (David Mermin)

Kontinuum:



Atomy: $\text{prob}(\psi) \propto \exp \left[-\frac{E(\psi)}{k_B T} \right], \quad S = k_B \ln W$

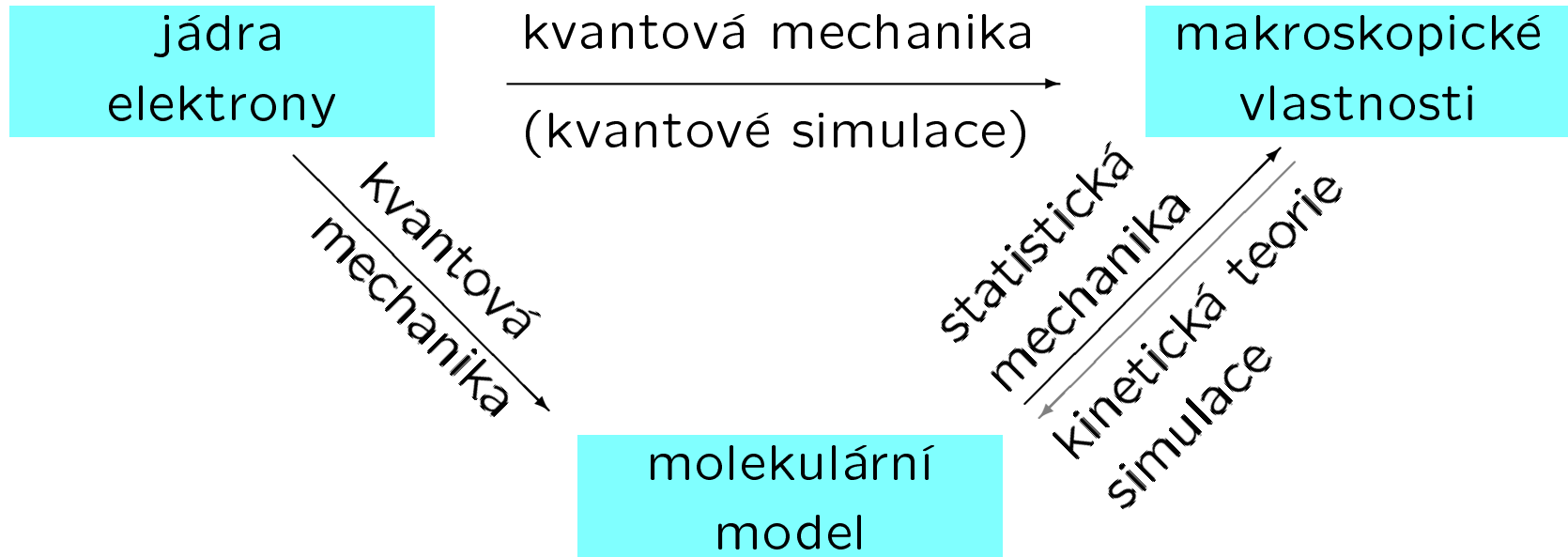
V principu umíme spočítat bod varu vody na 12 desetinných míst z veličin e , h , m_e , m_O , m_H , c .

V realitě to jde na tak 2 des. místa a týmy na tom pracují roky.

Přímo lze malé systémy:

- tvar a energie (malých) molekul, spektra, kinetika
- K pro reakce v plynné fázi
- pevná fáze

Velké systémy – dělba práce:



Co s (klasickými) modely:

- kinetická teorie plynů
- statistická termodynamika
- molekulární simulace