

Seznam vztahů pro předmět Teoretická chemie

Konstanty

$$\begin{aligned} e &= 1.60218 \cdot 10^{-19} \text{ C} & m_e &= 9.109382 \cdot 10^{-31} \text{ kg} & m_p &= 1.672622 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \\ h &= 6.62607 \cdot 10^{-34} \text{ J s} & \hbar &= 1.05457 \cdot 10^{-34} \text{ J s} & c &= 299792458 \text{ m s}^{-1} \text{ přesně} \\ k_B &= 1.38065 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} & R &= 8.3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} & N_A &= 6.02214 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \end{aligned}$$

Kvantová teorie

de Broglie: $p = h\tilde{\nu} = \hbar k$, Planck: $E = h\nu$

x -reprezentace: $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Schrödinger: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H}\psi$, $E\psi = \hat{H}\psi$

Heisenberg: $\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$, $\delta t \delta E \geq \frac{\hbar}{2}$

částice v krabici: $E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$, $n = 1, 2, \dots$

atom vodíku: $E_n = -\frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2} = -13.6057 \text{ eV} \frac{1}{n^2}$

Statistická termodynamika

Boltzmann: $\pi \propto \exp\left(\frac{-\mathcal{E}}{k_B T}\right)$, $S = k_B \ln W$

Tepelná vlnová délka: $\Lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$

Gibbsova energie ideálního plynu: $G_m^\circ = \mu = U_m^\circ(0) + RT \ln\left(\frac{\Lambda^3 p^{\text{st}}}{k_B T q_{\text{in}}}\right)$, $q_{\text{in}} = q_{\text{rot}} q_{\text{vib}} q_{\text{el}}$

$$q_{\text{rot}} = \frac{2Ik_B T}{\text{sym}\hbar^2}, \quad q_{\text{vib}} = \frac{1}{1 - e^{-x}}, \quad x = \frac{h\tilde{\nu}c}{k_B T}; \quad q_{\text{tr}} = \left(\frac{L}{\Lambda}\right)^3$$