1. Vlnová funkce základního stavu atomu vodíku je $\Psi = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-R/a_0}$, kde $a_0 = 53 pm$.

a) Vypočítejte nejpravděpodobnější vzdálenost výskytu elektronu od jádra.
b) Vypočítejte pravděpodobnost, že se elektron nachází v kouli o poloměru $R = a_0$.

Pro 1a) a 1b) uvažujte, že funkce je sféricky symetrická a že je tudíž třeba uvažovat pravděpodobnost výskytu částice v objemovém elementu $4\pi R^2 dR$.

2. Jaký je kvantově-chemický operátor potenciální energie atomu vodíku?

3. Jaký je fyzikální význam atomového orbitalu (jednoelektronové vlnové funkce)?

4. Úhlová část vlnové funkce $\Psi_{n,2,\pm 1}(r,\varphi,\theta)$ pro atom vodíku je rovna $Y_{2,\pm 1}(\varphi,\theta) = \mp \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\varphi}$. Příslušnou lineární kombinací získejte reálnou úhlovou funkci, která charakterizuje jeden z pěti *d* orbitalů. O jaký *d* orbital se jedná? *(Řešení: d_{xz} orbital)*

5. Ukažte, že $<\alpha|\hat{S}^2|\alpha> = <\beta|\hat{S}^2|\beta> = \frac{3}{4}\hbar^2$ a $<\alpha|\hat{S}^2|\beta> = <\beta|\hat{S}^2|\alpha> = 0$. (Je použitá Diracova notace $< f|\hat{A}|g > \equiv \int f^*(x)\hat{A}g(x)dx$). Vysvětlete význam.

6. Jaká je hodnota *J* nejvíce populované rotační hladiny molekuly ICl při teplotě 400 *K* Rotační konstanta $B = h^2/(8\pi^2 I)$ je 0.0114 cm^{-1}. Poznámka: hladina *J* je (2*J*+1)-násobně degenerovaná. *(Řešení: $J \approx 100$).*

Nápověda: Populace stavů se řídí Boltzmannovým rozdělením:

$$\frac{n_J}{n_{tot}} = \wp_J = \frac{g_J e^{-E_i/kT}}{\sum_{J=0}^{M} g_J e^{-E_J/kT}}$$

kde g_j je degenerační faktor (=2*J*+1).

Řešení k 1a.

$$dP = |\Psi|^2 \times 4\pi R^2 dR \Rightarrow \frac{dP}{dR} = 0 \Rightarrow R_{\max} = a_0$$

Řešení k 1b.

$$P = \frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^{a_0} 4\pi R^2 e^{-2R/a_0} dR = \frac{4}{a_0^3}\int_0^{a_0} R^2 e^{-2R/a_0} dR = \frac{4}{a_0^3}\left[-\frac{a_0}{2}R^2 e^{-2R/a_)}\Big|_0^{a_0} + a_0\int_0^{a_0} Re^{-2R/a_0} dR\right] =$$

$$-2e^{-2} + \frac{4}{a_0^2}\left[-\frac{a_0}{2}Re^{-2R/a_0}\Big|_0^{a_0} + \frac{a_0}{2}\int_0^{a_0} e^{-2R/a_0} dR\right] = -2e^{-2} - 2e^{-2} - \frac{4}{a_0^2}\frac{a_0^2}{4}e^{-2R/a_0}\Big|_0^{a_0} = -5e^{-2} + 1 = 0.323$$

Řešení k příkladu 6 ze cvičení 4.

(úhel θ je mezi osou *y* a vektorem *r*)

$$p_x = -ih\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right)\left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{x}{y}\right); r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right) = \frac{1}{1+\left(\frac{x}{y}\right)^2} \times \frac{1}{y} = \frac{y}{r^2} = \frac{\cos(\theta)}{r}$$

$$\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right) = \sin(\theta)$$

$$\hat{p}_x f = -i\hbar\frac{\cos(\theta)}{r}\left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right) - i\hbar\sin(\theta)\left(\frac{\partial f}{\partial r}\right) = -i\hbar\frac{\cos(\theta)}{r}\left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right)$$

analogicky

$$\hat{p}_y f = i\hbar\frac{\sin(\theta)}{r}\left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right)$$

pak

$$\hat{H}f = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\sin^2(\theta)}{r^2} + \frac{\cos^2(\theta)}{r^2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}\right)\right] \Rightarrow$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2I}\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right)$$