

11.1 Podle kvantové mechaniky lze popsat vlnovou funkci elektronu ve vodíku-podobném atomu následujícím tvarem

$$\Psi(r, \theta, \phi) = Ae^{-\frac{r}{a_0}}.$$

Určete podmínku na A aby tato vlnová funkce korektně popisovala elektronový stav $1s$ ve vodíku.

Hledáme takovou konstantu A , která vyhovuje normovací podmínce (jeden elektron)

$$\begin{aligned} 1 &= \int \|\Psi(r, \theta, \phi)\|^2 dV = \int A^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dV = \int_0^\infty 4\pi A^2 r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = \\ &= \pi A^2 a_0^3 \\ &\Downarrow \\ A &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}. \end{aligned}$$

11.2 Určete nejmenší a největší možné pozorovatelné vlnové délky v Lymanově a Paschenově sérii.

Obě série přechodů jsou speciálními případy Rydbergova vztahu ($R = 1,1 \cdot 10^7 \text{m}^{-1}$ Rydbergova konstanta)

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m$$

pro $m = 1$ (Lyman) a $m = 3$ (Paschen). Přímočarým dosazením $n = m + 1$ dostáváme maximální vlnovou délku 121 nm (L), resp 1870 nm (P), spočtením limity $n \rightarrow \infty$ získáme minimální možné vlnové délky 91 nm (L), resp. 820 nm (P).

11.3 Porovnejte velikosti přitažlivé gravitační a coulombovské síly mezi protonem a elektronem v základním stavu vodíkového atomu. Poloměr první kvantové dráhy je 0.53Å .

$$\frac{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}}{\kappa \frac{m_e m_p}{r^2}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \kappa m_e m_p} \sim 10^{39}$$

11.4 Určete ionizační energii elektronu v základním stavu vodíkového atomu. Vyjádřete tuto energii v eV.

Ionizační energie je energie potřebná na přechod z (v našem případě) základního stavu do stavu s nulovou energií. Pokud položíme potenciální energii rovnou nule v

nekonečnu pak ionizační energie je dána následujícím součtem:

$$\begin{aligned}
 E &= E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} \\
 E_{\text{pot}} &= \int_{r_0}^{\infty} F_C dr = \int_{r_0}^{\infty} -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} dr = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \\
 E_{\text{kin}} &= \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \\
 E &= -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} .
 \end{aligned}$$

Rychlost jsme určili z rovnosti dostředivé (F_C) a odstředivé síly, po dosazení poloměru dráhy v předchozím příkladě máme ionizační energii 13.6 eV.

11.5 Pomocí Hundových pravidel určete termy následujících atomu: C ($[He]2s^2 2p^2$), O ($[He]2s^2 2p^4$), Ca ($[Ar]4s^2$), Co ($[Ar]3d^7 4s^2$), Er ($[Xe]4f^{12} 6s^2$).

Přímočarou aplikací získáme následující: C (3P_0), O (3P_2), Ca (1S_0), Co ($^4F_{\frac{9}{2}}$), Er (3H_6); notace $^{2S+1}L_J$.