**Kvantová chemie, domácí cvičení 3**

**Jméno a příjmení**:

1. Atom skandia má elektronovou konfiguraci [Ar]4s2 3d1. Uzavřené elektronové slupky nepřispívají k celkovému momentu hybnosti, celkový moment hybnosti je tak dán momentem hybnosti elektronu ve stavu 3d1.
2. Jaká je velikost tohoto momentu hybnosti v jednotkách SI?
3. V nehomogenním magnetickém poli se molekulový paprsek štěpí v závislosti na hodnotě projekce momentu hybnosti do osy z. Na kolik čar se rozštěpí molekulový paprsek skandia?
4. Z přednášky si možná pamatujete, že energie částice o hmotnosti *m* pohybující se s momentem hybnosti po kružnici o poloměru *r* je dána vztahem:

kde moment setrvačnosti *I*=*mr*2. Podobný vztah můžeme použít i pro popis rotace dvouatomové molekuly, kdy ale hmotnost *m* musíme nahradit redukovanou hmotností

,

kde *m*A a *mB* jsou hmotnosti atomů A a B.

1. Vypočítejte rozdíl energie mezi základním a prvním rotačně excitovaným stavem molekuly CO, jejíž mezijaderná vzdálenost je 1,13 Å.
2. Jaká je vlnová délka fotonu, která je schopna způsobit přeskok ze základního do prvního rotačně excitovaného stavu molekuly CO?

1. \*\*\*Bonusová úloha\*\*\* Odhadněte, jaké je přibližně kvantové číslo *l*, se kterým se pohybuje planeta Země kolem Slunce.