**Kvantová chemie, domácí cvičení 5**

**Jméno a příjmení**:

1. Experimentátor použil laserový puls trvající 20 fs. Jaká bude neurčitost energie fotonů v tomto pulzu? Vyjádřete v absolutní hodnotě a jako relativní neurčitost, jestliže vlnová délka použitého světla byla 1064 nm.
2. Principu neurčitosti se dá využít ke kvalitativním odhadům. Odhadněme takto energii základního stavu atomu vodíku. Budeme předpokládat, že elektron je od jádra v průměru vzdálen na vzdálenost *r* Δ*x* a pohybuje se s průměrnou hybností *p* Δ*p*. Porovnejte s přesnou hodnotou. Návod: minimalizujte výraz pro celkovou energii a předpokládejte přitom stav s nejnižší neurčitostí.
3. Výpočet energie lithiového atomu se třemi různými odhady vlnové funkce poskytl hodnoty energie: -203,2 eV; -192,0 eV a -201,2 eV. Zvolte správná tvrzení:

a) *E*Li -203,2 eV

b) *E*Li -203,2 eV

c) *E*Li -192,0 eV

d) *E*Li -192,0 eV

e) *E*Li = -201,2 eV

1. Předpokládejme, že částice v krabici bude popsána vlnovou funkcí ve tvaru

. a) Může takováto funkce být vlnovou funkcí částice v krabici? b) Vypočítejte energii částice popsané touto zkusmou vlnovou funkcí (pokud je to možné) a porovnejte s přesnými hodnotami základního a prvního excitovaného stavu. Komentujte stručně svá zjištění.

1. \*\*\*Bonusová úloha\*\*\* Najděte odhad energie prvních 4 stavů částice v krabici s použitím zkusmé funkce , kde , , a .