**Kvantová chemie, domácí cvičení 6**

**Jméno a příjmení**:

1. Uvažujte částici pohybující se v potenciálové jámě, pro kterou platí

*V* = ∞ pro *x* ≤ 0 a *x* ≥ *L*

*V* = *c* pro 0 < *x* < *L*

Použijte poruchovou teorii k výpočtu energií těchto části. Jako referenční hodnotu použijte částici v nekonečné potenciálové jámě (pro kterou *c* = 0). Udejte hodnotu *E(0), E(1)* a *E(2)*.

1. Existuje ion H-? Vypočítejte a) energii b) ionizační energii tohoto iontu. Předpokládejte, že se oba elektrony nachází v 1s orbitalu, ale efektivní náboj *Z*’ ve vlnové funkci je variační parametr. Nápověda: využijte variační integrál odvozený na přednášce pro atom helia.
2. Na níže uvedených křivkách je znázorněna závislost potenciální energie na mezijaderné vzdálenosti molekuly HF. Definujme si koordinátu *q*=*R*-*R*e, kde *R*e je rovnovážná mezijaderná vzdálenost. Potenciální energii pak můžeme rozvinout v řadu:

kde *k* je silová konstanta harmonického oscilátoru *b* a *c* jsou anharmonické konstanty. Harmonický a anharmonický rozvoj jsou taktéž ukázány na obrázku. Pro HF je (v jednotkách SI) *k* = 924 N.m-1, *b* = 2,85.1012 N.m-2 a *c* = 2,33.1023 N.m-3. Vypočítejte

1. Harmonickou vibrační frekvenci a vlnočet (v jednotkách cm-1).
2. Energii při excitaci molekuly ze základního vibračního do prvního vibračně‑excitovaného stavu (uvažujte pouze harmonický potenciál).
3. Energii základního stavu s korekcí na anharmonicitu s použitím prvního řádu teorie poruch.

