**Kvantová chemie, domácí cvičení 9**

**Jméno a příjmení**:

1. U následujících tvrzení určete pravdivostní hodnotu

* Bornovu-Oppenheimerovu aproximaci zavedl Max Born-Oppenheimer.
* Pro diatonickou molekulu je *D*0 větší než *De*.
* Elektronová vlnová funkce se mění s geometrií molekuly.
* U dvouatomových molekul se zachovává moment hybnosti.

1. Molekula vodíku v základním stavu má hodnotu *D*0 = 4,478 eV. Molekula H2+ má *D*0= 2,651 eV. Jistě pak dobře víte, jakou energii má atom vodíku. Z těchto údajů vypočítejte: a) Změnu entalpie pro reakci H2 → 2H při teplotě absolutní nuly. b) Ionizační energii molekuly vodíku.
2. Spektroskopici milují molekulu I2. Báječně totiž absorbuje ve viditelné a UV oblasti. Na obrázku máte potenciálové křivky této molekuly (převzato z *J. Mol. Struct.* 162, **138** (1989)). Z grafu určete:
3. Jaká je hodnota rovnovážné vzdálenosti pro I2 ve stavech 1 a 3.
4. Jaká je hodnota *De*(v jednotkách eV) pro molekulu I2 ve stavech 1 a 3.
5. Jakou je nevyšší vlnová délka (v jednotkách nm), kterou bude molekula jódu absorbovat? Jakou budou mít páry jódu barvu?
6. Jaká je hodnota velikosti spinu (v násobcích ) u molekuly jódu ve stavu 3?
7. Vibrační vlnočet molekuly I2 ve stavu 1 je 215 cm-1. Vypočítejte energii nulového bodu a s použitím výsledku z bodu b odhadněte hodnotu *D*0.



1. Všechny jednotky v předchozím příkladu jsou zadány v tzv. atomových jednotkách. V této soustavě jednotek považujeme za jednotkové redukovanou Planckovu konstantu, hmotnost elektronu a coulombovský faktor . Úkoly:

a) Napište Schrödingerovu rovnici pro atom vodíku v atomových jednotkách.

b) Vypočítejte energii základního stavu atomu vodíku v atomových jednotkách.

c) \*\*\*Bonus\*\*\* Vypočítejte rychlost světla ve vakuu v atomových jednotkách. Návod: použijte rozměrovou analýzu.