Pokročilá fyzikální chemie - seminář (C4040)

Seminární cvičení č. 10, Atomová spektroskopie

1. Orbital je charakterizován vedlejším kvantovým číslem 1.
   Vedlejší kvantové číslo bývá označováno l.
   (a) Jaké nemůže mít hlavní kvantové číslo?
   Pro $l = 1$ nemůže nastat $n = 0$. Možná čísla jsou $n \geq 1$.
   (b) Kolik různých orientací momentu hybnosti do osy z lze pozorovat?
   Mohou nastat 3 orientace odpovídající $m_l = -1, 0, 1$.

2. Spinové kvantové číslo elektronu je $s = 1/2$. Jaká je velikost spinového momentu hybnosti elektronu?
   $\sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{3/4}\hbar$

3. Ke kvantovému číslu orbitálního momemntu hybnosti (l) náleží magnetické kvantové číslo (m_l). Tato dvě čísla společně definují orbital. Jaký je mezi nimi vztah?
   m_l udává průmět orbitálního momentu hybnosti do (arbitrálně zvolené) osy z v násobcích redukované Planckovy konstanty. Z kvantového čísla l lze spočítat velikost orbitálního momentu hybnosti $|L| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$.

4. V kužílkovém znázornění vyobraz rozdíl mezi orbitalem s $l = 1$ a $l = 2$. Pro každý z nich znázorni všechny povolené kvantové stavy a spočítej úhel, který svírají s osou z. pro $l = 1, \alpha = 45°$ pro $l = 2, \alpha^1 = 65.9°, \alpha^2 = 35.3°$.

5. Johann Jakob Balmer v roce 1885 publikoval matematickou studii ve které zanalyzoval 4 spektrální čáry atomu vodíku ($\lambda = 6562.1, 4860.74, 4340.1, 4101.2\,\text{Å}$), které pozoroval Anders Ångstrom. Jedná se o přechody na druhou nejnižší energetickou hladinu. Jaká by z těchto dat vyšla konstanta, kterou dnes nazýváme Rydbergova? Jako její neurčitost uveď vypočítanou standardní chybu. $1/\lambda = R_\text{H}(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}), R_\text{H} = 10\,972\,200 \pm 100\,\text{m}^{-1}$.

6. Jaké nejkratší a nejdelší vlnové délky lze očekávat, že budou pozorovatelné v Balmerově spektrální sérii?
   $1/\lambda = R_\text{H}(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}), m = 2, n_1 = 3, n_2 = infinity, \lambda_1 = 656\text{nm}, \lambda_2 = 365\text{nm}$.

7. Uvažujeme-li lithium v základním stavu a stavy vzniklé excitací valenčního elektronu.
   (a) Jaké elektronové termy jsou možné?
   (b) Jaké jsou degenerace pro každy term odvozený od patřičné konfigurace?
   (c) Přechody mezi kterými jsou pozorovány, jestliže výběrová pravidla jsou: Δn je neomezeno, $\Delta l = \pm 1$.

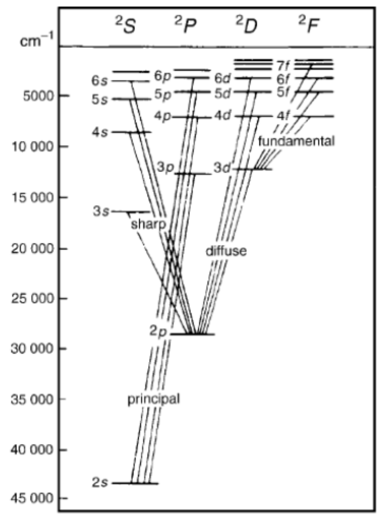

Figure 7.6 Grotrian diagram for lithium

Termy: ${}^2S$, ${}^2P$, ${}^2D$, ${}^2F$, degenerované (2, 6, 10, 14 krát), možné přechody jsou: ${}^2S \to {}^2P$, ${}^2S \to {}^2P, {}^2P \to {}^2D$, ${}^2D \to {}^2F$.

8. Uvaž vodík v elektronové konfiguraci $1s^1$, $2s^1$, a$2p^1$. Jaké termy tyto stavy popisují a kolikrát je který z nich degenerovaný? $1s^1\,{}^2S(deg = 2), 2s^1\,{}^2S(deg = 2), 2p^1\,{}^2P(deg = 6)$

9. Uvaž stavy He: $1s^2$; $1s^1, 2s^1$; $1s^1, 2p^1$; $1s^1, 3d^1$.Jaké termy tyto stavy popisují a kolikrát je který z nich degenerovaný?

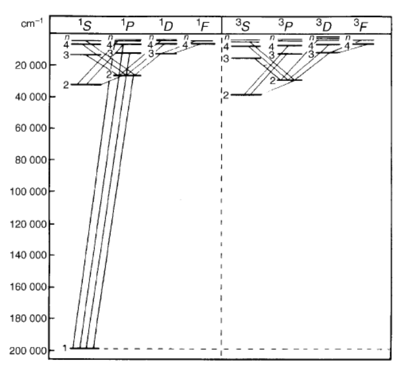

Figure 7.9 Grotrian diagram for helium. The scale is too small to show splittings due to spin–orbit coupling

$1s^2;\ {}^1S(deg = 1), 1s^1, 2s^1;\ {}^1S(deg = 1),\ {}^3S(deg = 3);\ 1s^1, 2p^1;\ {}^1P(deg = 3),\ {}^3P(deg = 9);\ 1s^1, 3d^11;\ {}^1D(deg = 5),\ {}^3D(deg = 15)$