

Kvantová chemie

Cvičení 7

Atom helia

Problém 1 (Hejtman)

Pomocí výsledků (všech) přibližných výpočtů uvedených v lekci 7 určete ionizační potenciál (energii nutnou k odtržení jednoho elektronu) atomu helia a srovnajte ho s literární hodnotou (24,6 eV). [Návod: Ionizační potenciál počítejte jako rozdíl energií základního stavu atomu He a iontu He⁺.]

Problém 2 (Toběrný)

Pomocí výsledků (všech) přibližných výpočtů uvedených v lekci 7 určete energii základního stavu iontů Li⁺ a Be²⁺ a srovnajte je s literárními hodnotami (-198,1 eV a -371,6 eV).