

Kvantová chemie

Cvičení 3

Atom vodíku

Problém 1

Odvoďte tvar klasické Hamiltonovy funkce atomu vodíku po přechodu do těžiškové soustavy. (Návod: Přechod do těžiškové soustavy proveďte nejdříve pro [Lagrangeovu funkci](#), $L(\vec{r}_p, \dot{\vec{r}}_p, \vec{r}_e, \dot{\vec{r}}_e) = \frac{1}{2}m_p\dot{\vec{r}}_p^2 + \frac{1}{2}m_e\dot{\vec{r}}_e^2 - \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\|\vec{r}_p - \vec{r}_e\|}\right)$, a následně [přeiděte](#) k funkci Hamiltonově.)

Problém 2 (Hůla)

Dokažte komutační relace $[\Delta, \hat{L}^2] = 0$, $[\Delta, \hat{L}_z] = 0$ s využitím vyjádření uvedených operátorů ve sférických souřadnicích.

Problém 3

Odvoďte „okrajovou“ podmínku $\int_0^{+\infty} r^2 R_{kl}^2(r) dr < +\infty$ z předpokladu $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$.

Problém 4

Odvoďte rovnici pro $\chi_{kl}(r)$ z rovnice pro $R_{kl}(r)$.

Problém 5 (Toběrný)

Napište explicitní tvar (bez normovací konstanty) všech funkcí $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ pro $n = 1, 2$ a 3 .