

### 1. Částice v krabici

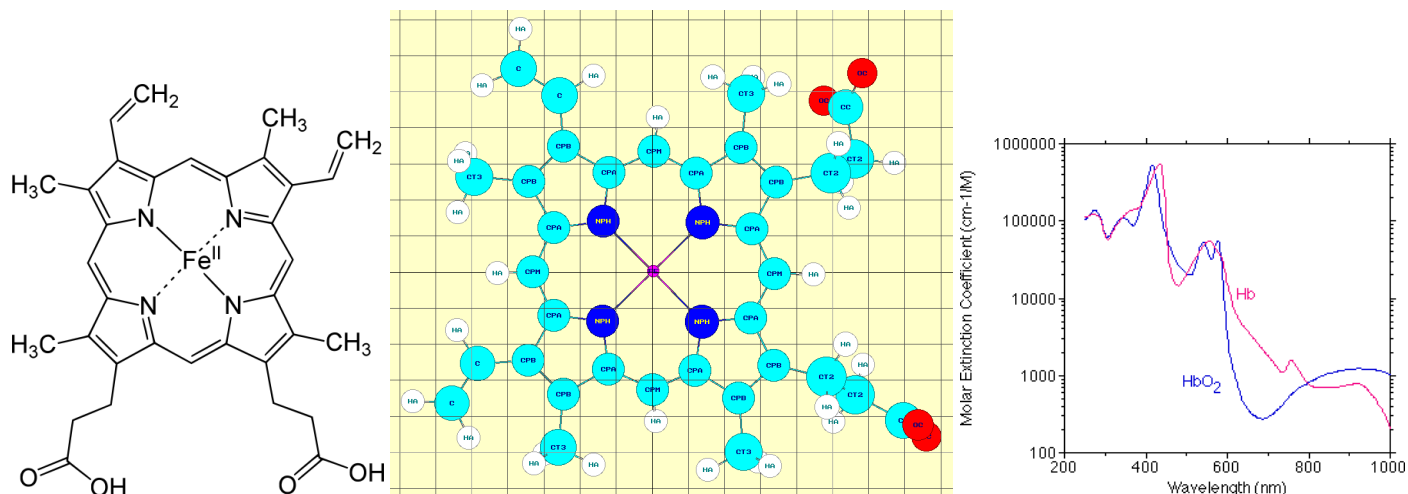
Průměr póru v zeolitu je asi 5.5 Å. Na základě modelu 2D krabice odhadněte kinetickou energii nulového bodu (energií základního stavu) atomu helia v póru.

$$E_0 = 0.3 \text{ meV}$$

### 2. Částice v krabici

Odhadněte barvu hemoglobinu, jehož b-podjednotku vidíte na obrázku. Použijte model elektronu v dvojdimenzionální čtvercové jámě. Rozměry jámy odhadněte z modelu hemoglobinu v silovém poli CHARMM22, mřížka je po 1 Å. Uvědomte si, že přechody měnící zároveň obě kvantová čísla (ve směrech x a y) nejsou povolené.

$$\lambda_{max} \approx 420 \text{ nm}$$



### 3. Variační princip

Uvažujme částici v krabici v 1D. Funkce (nenormalizovaná)

$$\psi = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

je vlastní funkcí, funkci

$$\phi = x(L - x)$$

lze považovat za její aproximaci. Porovnejte energie, které dostanete s  $\phi$  a  $\psi$ .

$$\frac{E_\psi}{E_\phi} = 1.0132 = 10/\pi^2$$