

$$e=1.6021765e-19 = 1.602e-19 \text{ C}$$

$$h=6.626069e-34 = 6.626e-34 \text{ Js}$$

$$c=299792458 = 2.998e+08 \text{ ms}^{-1}$$

$$m_e=9.1093821e-31 = 9.109e-31 \text{ kg}$$

$$N_A=6.0221418e+23 = 6.022e+23 \text{ mol}^{-1}$$

1. Částice v krabici

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

Λππ ε:0

$$L=5.5e-10 = 5.5e-10 \text{ m}$$

$$n=1+1 = 2$$

$$m=0.004/N_A = 6.642e-27 \text{ kg}$$

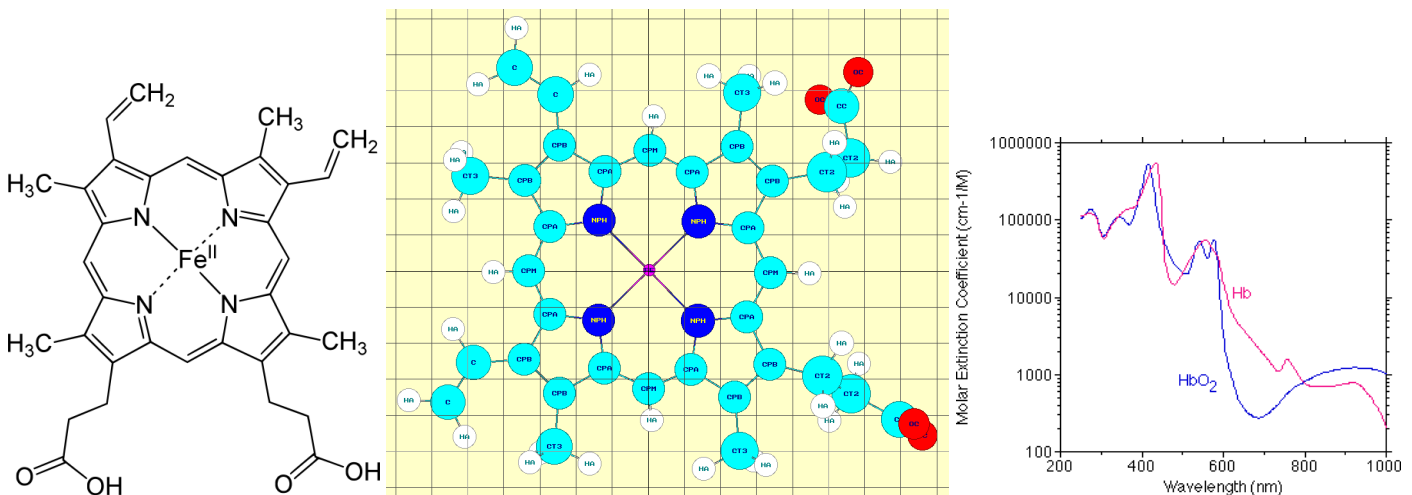
$$E=n \cdot h^2 / 8mL^2 = 5.463e-23 \text{ J}$$

$$E/e = 0.000341 \text{ eV}$$

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.

ππ 007, i 700 nm



$$L=8e-10 = 8e-10 \text{ m}$$

$$d_{nn}=5 = 5$$

$$DE=d_{nn} \cdot h^2 / 8m_e / L^2 = 4.707e-19 \text{ J}$$

$$\lambda = h \cdot c / DE = 4.22e-07 \text{ m}$$

$$d_{nn}=3 = 3 \text{ alt}$$

$$DE=d_{nn} \cdot h^2 / 8m_e / L^2 = 2.824e-19 \text{ J}$$

$$\lambda = h \cdot c / DE = 7.034e-07 \text{ m}$$

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 ϕ a ψ .