

```

! ===== Helium =====
! a) -----
T=2 ! [K]
2
m=M(He)*1e-3/NA ! [kg]
6.6464759 · 10-27
Lambda=h/√(2*pi*m*k*T) ! [m]
6.1704018 · 10-10
! b) -----
rho=125 ! [kg m-3]
125
N=rho*1e3/M(He)*NA ! [m-3]
1.8806959 · 10+28
dist=1/N↑(1/3) ! [m]
3.7603402 · 10-10
! c) -----
L=1e-4
0.0001
x=h↑2/8/m/L↑2/k/T
2.9903138 · 10-11
qx=L/Lambda
162064
nmax=int(√(-ln(1e-16*qx)/x)) ! chyba 1e-16
911520
q=sum n=nmax,1,-1 exp(-x*n↑2)
162063.5
q-qx
-0.50000024
(q/qx)↑3-1
-9.2555785 · 10-06
! ===== entropie Ar =====
T=298.15 ! [K]
298.15
m=M(Ar)*1e-3/NA ! [kg]
6.6335203 · 10-26
Lambda=h/√(2*pi*m*k*T) ! [m]
1.5996859 · 10-11
p=1e5 ! [Pa]
100000
Sm=R*(2.5+ln(k*T/p/Lambda↑3)) ! [J K-1 mol-1]
154.84586
! ===== q_rot HCl =====
! přibližně z 3->4:
B=83.03*100/4/2
1037.875
T=298.15 ! [K]
298.15
def Erot=B*h*c*J*(J+1)
q_klasicky=k*T/(h*c*B)
19.966265
q_rot=sum J=0,100 (2*J+1)*exp(-Erot/k/T)
20.30297
! přesněji fit
! nu(J-1 -> J) = a+b*J+cc*J↑2
a=-0.70071428951684*100
-70.071429
b=21.0761904771357*100
2107.619
cc=-0.0378571429155481*100
-3.7857143
def Erot=h*c*J*(a+b*(J+1)/2+cc/6*(J+1)*(2*J+1))
q_best=sum J=0,100 (2*J+1)*exp(-Erot/k/T)
20.377877
! ===== q_el B =====
E=1525.4*c*h
3.030124 · 10-22
T=1000
1000
q_el=2+4*exp(-E/k/T)
5.913168

```

! ===== fotosféra Slunce (H -> H+ + e-) =====  
 ! anion H- -0.527751+0.5 Eh (pro m=infty)  
 ! nebo 72.77 kJ/mol => 0.755 eV  
 T=5800 ! [K]

5800

! T=4400 korona

p=1e4 ! [Pa]

10000

Lambdae=h/√(2\*pi\*me\*k\*T) ! [m]

9.787363 · 10<sup>-10</sup>

! a) rovnovaha -----

! H -&gt; H+ + e-

Eion=Hartree/2/NA ! [J] ionizační energieH

2.179872 · 10<sup>-18</sup>

! Lambda(H)=Lambda(H+) (pokrátí se)

! q\_in(H)=2 (spin e), q\_in(e)=2 (pokrátí se)

! q\_in(H+)=1

! volíme pst=p

K=exp(-Eion/k/T)\*(k\*T/p/Lambdae↑3)

1.2857925 · 10<sup>-08</sup>

! =====

! látka začátek rovnováha

! -----

! H 1 1-x

! H+ 0 x

! e- 0 x

! -----

! n(g) 1 1+x

! =====

solve x=0,0.01 K-(x/(1+x))↑2/((1-x)/(1+x))

0.00011339279

! b) klasicka mechanika -----

dist=(k\*T/p)↑(1/3)

2.0006475 · 10<sup>-08</sup>

dist/Lambdae ! počet de Broglieho vln mezi atomy

20.441129

! c) (i) -----

E2=Eion\*3/4 ! stav n=2 (g=8)

1.634904 · 10<sup>-18</sup>

exp(-E2/k/T)\*8/2 ! nepatrně (2=g pro n=1)

5.4362848 · 10<sup>-09</sup>

n=1000000

1000000

E2=Eion\*(1-1/n↑2)

2.179872 · 10<sup>-18</sup>

exp(-E2/k/T)\*n↑2 ! hodně (a SUM\_n diverguje)

1.5054151

! tento údaj ale už nemá smysl, protože elektron

! by byl dál než průměrná vzdálenost mezi protony

! c) (ii) -----

! H + e- -&gt; H- g(H)=g(e)=2, g(H-)=1

Eaf=-72.77e3/NA ! [J], exotermické

-1.2083741 · 10<sup>-19</sup>

Kaf=exp(Eaf/k/T)/(k\*T/p/Lambdae↑3)/4

6.4725341 · 10<sup>-06</sup>

! ==&gt; H- mnohem méně než e- (entropie převáží)

! c) (iii) -----

Edis=4.52\*e ! [J] = Edis(H2) (H2 -&gt; 2H)

7.2418377 · 10<sup>-19</sup>

LambdaH2=h/√(2\*pi\*M(H2)\*1e-3/NA\*k\*T) ! [m]

1.6145567 · 10<sup>-11</sup>

LambdaH=h/√(2\*pi\*M(H)\*1e-3/NA\*k\*T) ! [m]

2.283328 · 10<sup>-11</sup>

I=0.74e-10↑2\*M(H)\*1e-3/2/NA

4.5826548 · 10<sup>-48</sup>

qrot=I\*k\*T/hbar↑2 ! NB: symetrická molekula

32.99717

nu=1.28e14 ! [Hz] (nevalná přesnost)

1.28 · 10<sup>+14</sup>

Evib=nu\*h ! [J]

8.4813683 · 10<sup>-20</sup>

qvib=sum n=0,100 exp(-Evib\*n/k/T)

1.530815

qinH=2 ! 2 stavy H

2

KH2=exp(-Edis/k/T)\*(k\*T/p\*LambdaH2↑3/LambdaH↑6\*qinH↑2)/qrot/qvib

2225.2329

solve x=1e-6,.999999 KH2-(2\*x/(1+x))↑2/((1-x)/(1+x))

0.99910243

! ==&gt; 0.1 % H2