

Kvantna kemija

Seminar

2.6.2025.

1. Odredite frekvenciju i valni broj zračenja valne duljine od 2537 Å te energiju fotona tog zračenja u elektronvoltima.

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}}{2537 \cdot 10^{-10} \text{ m}} = 1,18 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2537 \cdot 10^{-10} \text{ m}} = 3,94 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1} = 3,94 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$$

$$E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}}{2537 \cdot 10^{-10} \text{ m}} = 7,84 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 4,90 \text{ eV}$$

2. Apsolutni prag osjetljivosti na tamu priviknutog ljudskog oka za svjetlost valne duljine 510 nm je izmjeren kao $3,5 \cdot 10^{-17}$ J na površini rožnice. Odredite broj fotona kojem odgovara taj prag.

$$E = 3,5 \cdot 10^{-17} \text{ J}$$

$$N = \frac{E}{E_{\text{fotona}}} = \frac{E}{h \cdot \nu} = \frac{E \cdot \lambda}{h \cdot c}$$

$$N = \frac{3,5 \cdot 10^{-17} \text{ J} \cdot 510 \cdot 10^{-9} \text{ m}}{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}} \approx 90$$

3. Energija potrebna da se elektron izbaci iz atoma cezija iznosi 2,14 eV. Izračunajte kinetičku energiju i brzinu elektrona emitiranog kad se cezij obasja zračenjem valne duljine: a) 700 nm; b) 300 nm.

FOTOELEKTRIČNI EFEKT

$$E_K = E_f - \Phi$$


Izlazni rad

Nije energija ionizacije jer je riječ o metalu u čvrstom stanju!

$$E_f < \Phi \rightarrow E_K < 0$$

Nema fotoel. efekta

$$E_f \geq \Phi \rightarrow E_K \geq 0$$

Opaža se fotoel. efekt

$$\text{a) } E_{\text{K}} = \frac{h \cdot c}{\lambda} - \Phi = -5,9 \cdot 10^{-20} \text{ J} < 0$$

$$\text{b) } E_{\text{K}} = \frac{h \cdot c}{\lambda} - \Phi = 3,19 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$E_{\text{K}} = \frac{m_{\text{e}} \cdot v^2}{2} \rightarrow v = \sqrt{\frac{2 \cdot E_{\text{K}}}{m_{\text{e}}}}$$

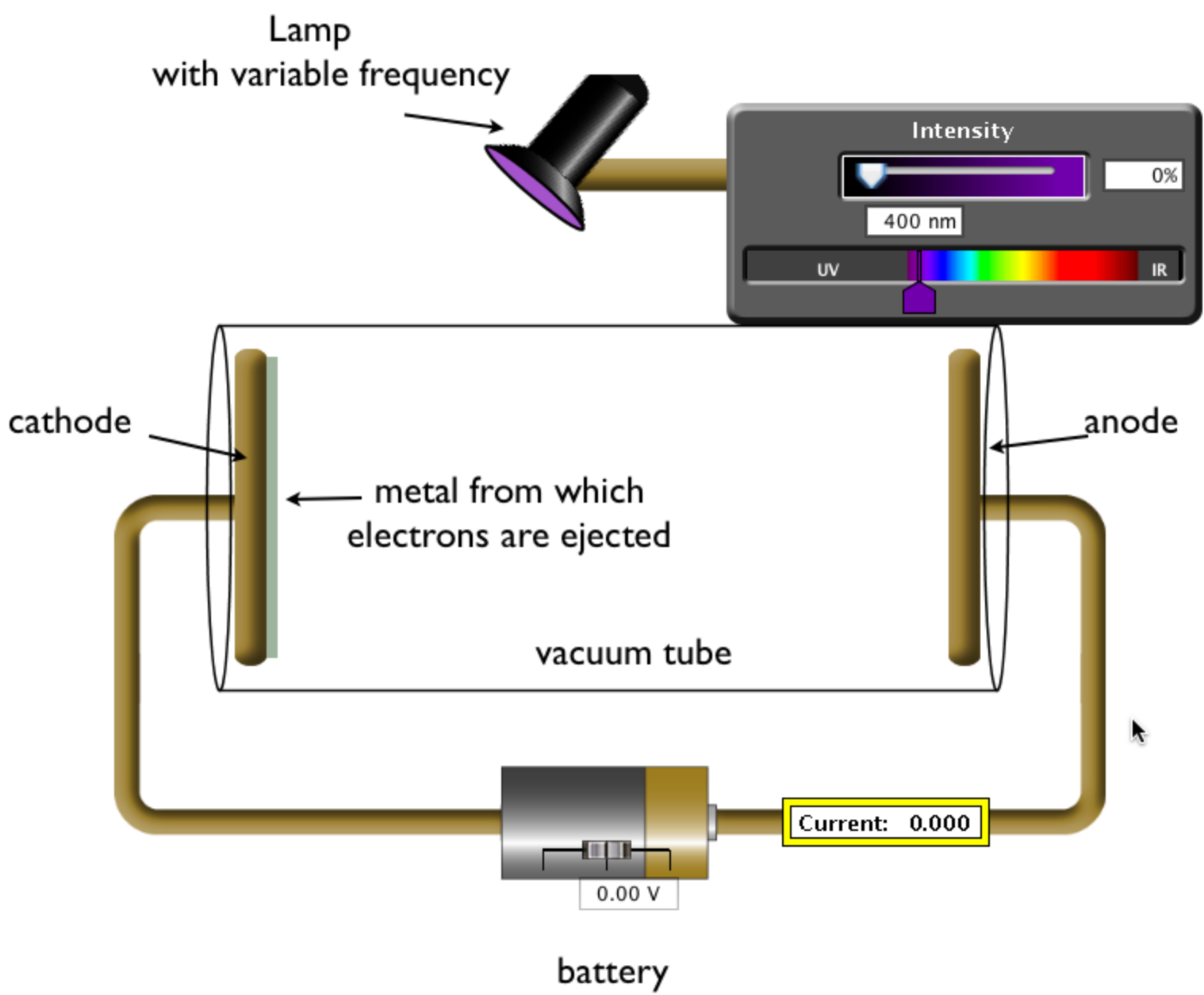
$$m_{\text{e}} = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$v = 8,37 \cdot 10^5 \text{ m s}^{-1}$$

4. Površina nekog metala obasjana je svjetlošću različitih valnih duljina. Ovisnost potencijala kojim su zaustavljeni emitirani elektroni o valnoj duljini upadnog zračenja dana je u sljedećoj tablici:

λ/nm	366	405	436	492	546	579
U/V	1,48	1,15	0,93	0,62	0,36	0,24

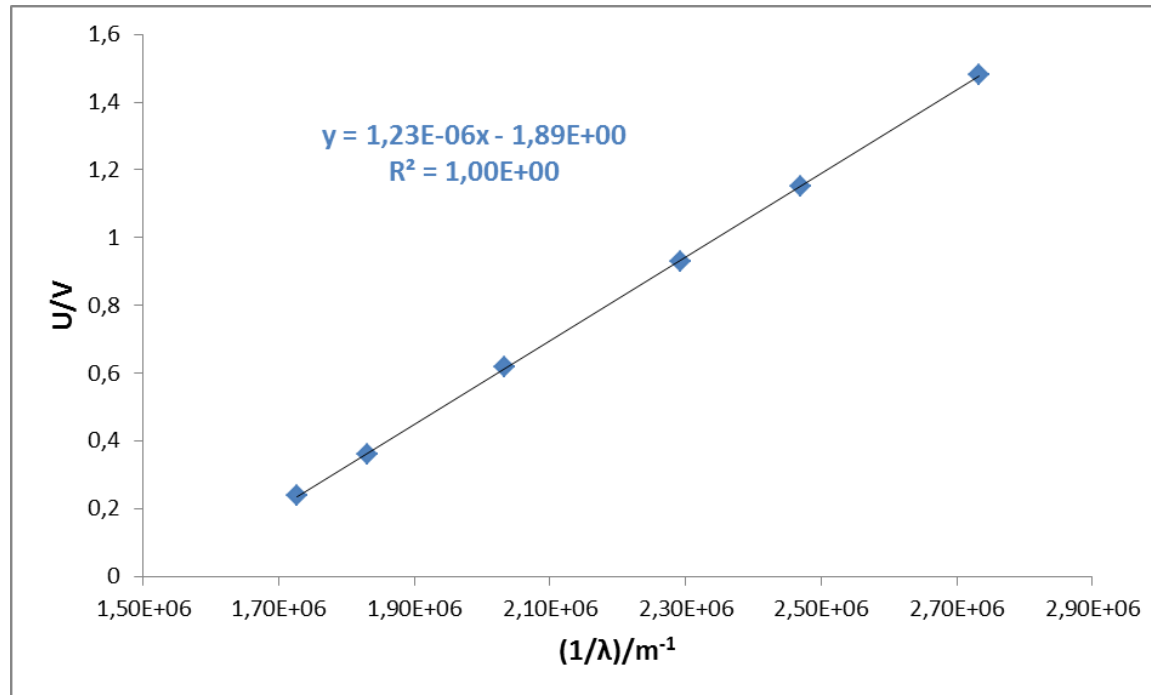
Odredite vrijednost Planckove konstante i minimalnu frekvenciju upadnog zračenja koje će uzrokovati fotoelektrični efekt na tom metalu.



$$E_k = U \cdot e$$

$$\frac{h \cdot c}{\lambda} - \Phi = U \cdot e$$

$$\underset{Y}{U} = \frac{h \cdot c}{e} \cdot \underset{X}{\frac{1}{\lambda}} - \frac{\Phi}{e}$$



$$\frac{h \cdot c}{e} = 1,23 \cdot 10^{-6} \text{ V m}$$

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$\text{V} \cdot \text{C} = \text{J}$$

$$h = 6,57 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

Minimalni uvjet za fotoelektrični efekt:

$$E_f = \Phi \rightarrow E_K = 0$$

$$h \cdot \nu_{\min} = \Phi \quad \leftarrow \quad -\frac{\Phi}{e} = -1,89 \text{ V}$$

$$\nu_{\min} = 4,61 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

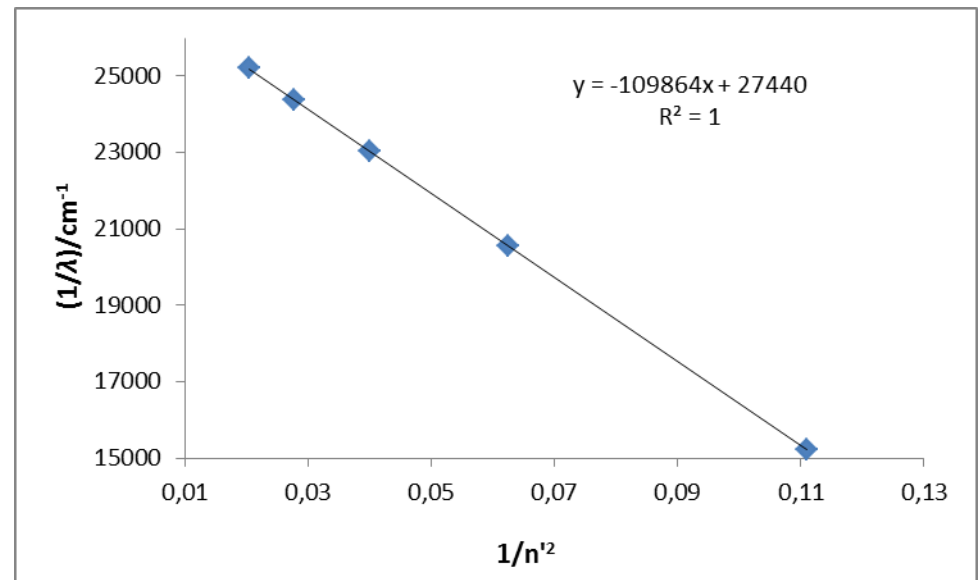
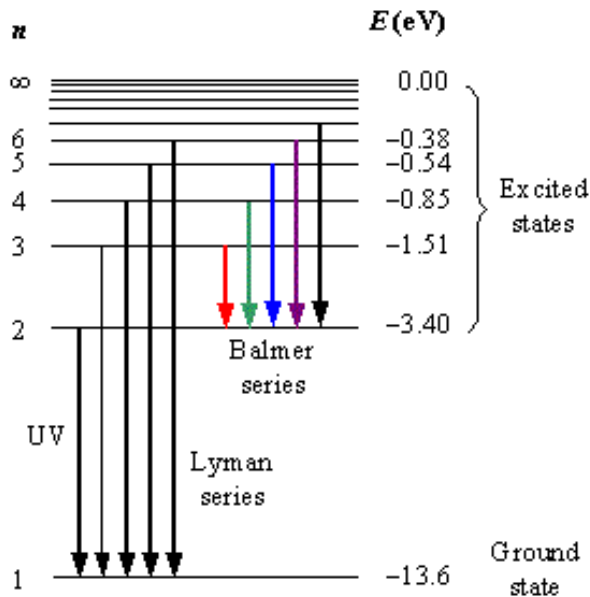
5. Snimljen je emisijski spektar atoma vodika te su assignirane linije Balmerove serije ($n'' = 2$).

n'	λ/nm
3	656,3
4	486,2
5	434,0
6	410,1
7	396,7

Odredite vrijednost Rydbergove konstante za vodik te energiju ionizacije iz osnovnog stanja!

$$\nu = R_H \left(\frac{1}{(n'')^2} - \frac{1}{(n')^2} \right)$$

$$\nu = R_H \frac{1}{(n'')^2} - R_H \frac{1}{(n')^2}$$



$$-R_H = -109864 \text{ cm}^{-1}$$

$$R_H = 109864 \text{ cm}^{-1}$$

Iz nagiba pravca

Energija ionizacije iz osnovnog stanja

$$n' = \infty \leftarrow n'' = 1$$

$$E_i = E(\infty) - E(1)$$

$$E_i = h \cdot c \cdot \tilde{\nu}(n' = \infty \leftarrow n'' = 1)$$

$$\nu = R_H \frac{1}{(n'')^2} - R_H \frac{1}{(n')^2} \rightarrow 0 \quad \nu = R_H$$

$$E_i = h \cdot c \cdot R_H = 2,186 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,64 \text{ eV}$$

6. Koja linija Balmerove serije ($n'' = 2$) u spektru atomskog vodika ima valnu duljinu 3835 Å?

$$\nu = R_H \left(\frac{1}{(n'')^2} - \frac{1}{(n')^2} \right)$$

$n' = 3$	1. Linija
$n' = 4$	2. Linija
....	
N	$N-2$ linija

$$n' = ?$$

$$n' = \sqrt{\frac{(n'')^2 \cdot R_H}{R_H - \tilde{\nu} \cdot (n'')^2}}$$

Literaturna vrijednost

$$R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$n' = \sqrt{\frac{4 \cdot 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}}{1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} - 4 \cdot (3,835 \cdot 10^{-7} \text{ m})^{-1}}}$$

$$n' = 9$$

7. Linija Balmerove serije

7. Odredite brzinu elektrona na prvoj i trećoj putanji u Bohrovu modelu atoma vodika. Koliki su radijusi tih putanja? Odredite energiju ionizacije atoma vodika iz trećeg energijskog nivoa (treća putanja).

$$v(n) = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} \cdot \frac{1}{n}$$

$$r(n) = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \cdot n^2$$

$$E(n) = -\frac{hcR_H}{n^2}$$

$$m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$$

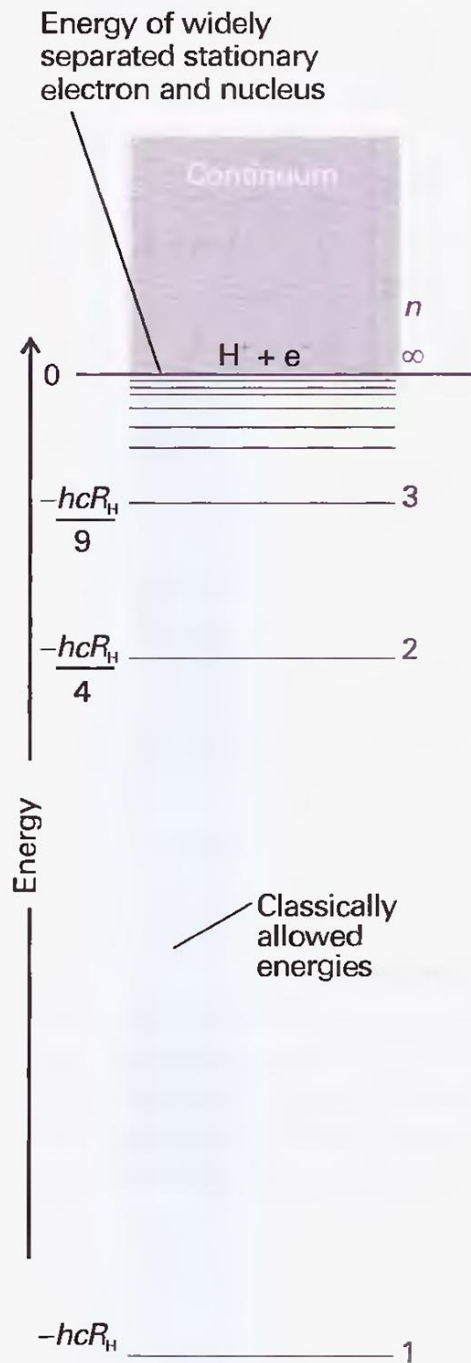
$$F = \frac{C}{V}$$

$$v(1) = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} = 2,187 \cdot 10^6 \text{ m s}^{-1}$$

$$r(1) = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad \text{Bohrov radijus}$$

$$v(3) = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} \cdot \frac{1}{3} = 7,29 \cdot 10^5 \text{ m s}^{-1}$$

$$r(3) = 9 \cdot \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 4,76 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$



Energija ionizacije iz 3. razine

$$n' = \infty \leftarrow n'' = 3$$

$$E_i = E(\infty) - E(3) = \frac{hcR_H}{9} = 2,42 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$E_i = 1,51 \text{ eV}$$

8. Odredite valnu duljinu pridruženu:

a) elektronu koji se kreće brzinom $6,6 \cdot 10^7 \text{ m s}^{-1}$

b) kuglici mase 1 g koja se giba brzinom 100 m s^{-1}

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$

De Broglie

Relativistička masa

Za jako velike brzine,
bliske brzini svjetlosti u
vakuumu

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}$$

$$\text{a) } \lambda = \frac{h \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}{m_0 \cdot v} = 1,075 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

 masa elektrona

Paziti na mjerne jedinice!

$$\text{b) } \lambda = \frac{h}{m \cdot v} = 6,626 \cdot 10^{-33} \text{ m}$$

 masa kuglice

9. Čestica mase m nalazi se u sferičnoj posudi polumjera r . Iz načela neodređenosti odredite minimalnu kinetičku energiju te čestice. Primijenite taj rezultat na elektron u kuglama polumjera: a) $r = 100 \text{ pm}$ i b) $r = 1 \text{ fm}$.

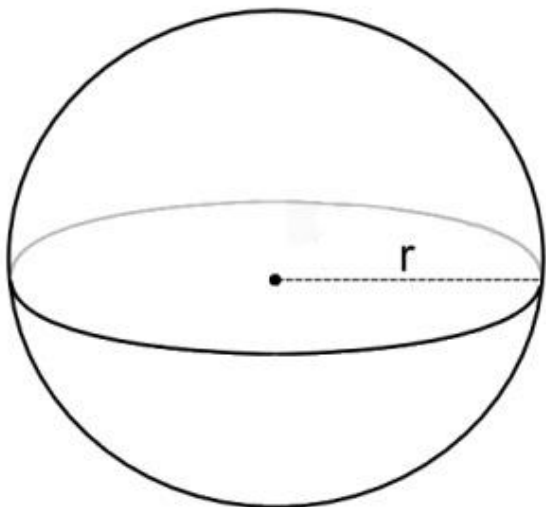
$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$$

Heisenbergovo načelo
neodređenosti

$$p = m \cdot v$$

$$E_k = \frac{m \cdot v^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$

$$p = \sqrt{2 \cdot m \cdot E_k}$$



Minimalna kinetička
energija $\rightarrow$ minimalna
neodređenost količine
gibanja $\rightarrow$ maksimalna
neodređenost položaja

$$\Delta x = r$$

$$r \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot E_K} = \frac{h}{4\pi}$$

...

$$E_K = \frac{h^2}{32 \cdot m \cdot \pi^2 \cdot r^2}$$

$$1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$$

$$1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$$

$$\text{a) } E_K = 1,526 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$\text{b) } E_K = 1,526 \cdot 10^{-9} \text{ J}$$