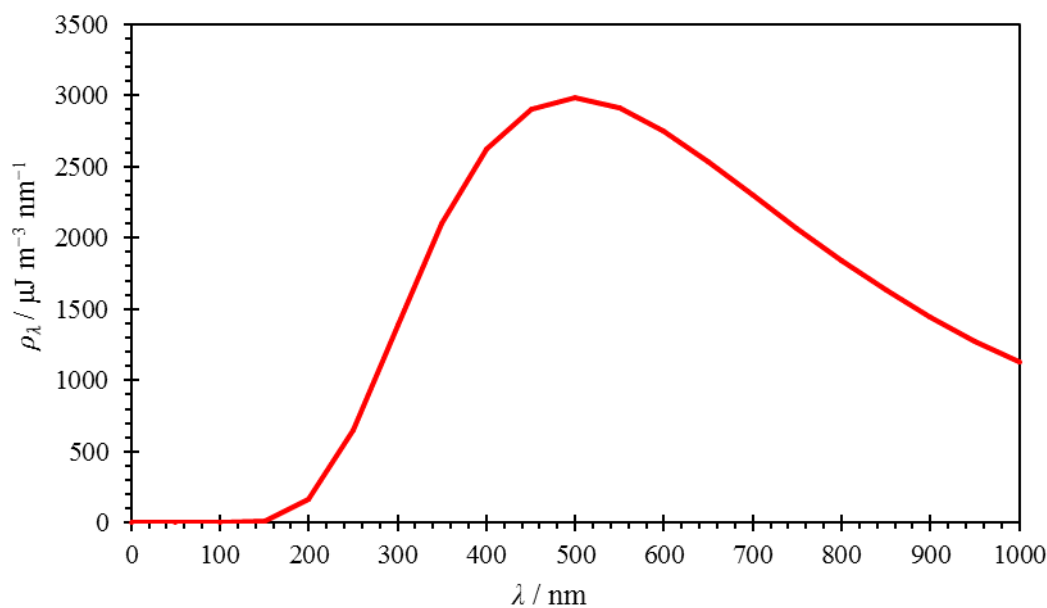


§ 4. KVANTNA KEMIJA

4.1. Stara kvantna teorija

Z111. Sunce se može aproksimirati crnim tijelom, jer gotovo idealno apsorbira i emitira elektromagnetsko zračenje (slika 95.).



Slika 95. Spektralna gustoća energije u ovisnosti o valnoj duljini zračenja Sunca.

a) Izvedite Wienov zakon pomaka za $\lambda < 1 \mu\text{m}$ iz Planckove jednadžbe:

$$\rho_\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5 \left(e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1 \right)}$$

- b) Iz slike 95. procijenite valnu duljinu maksimalne emisije zračenja s površine Sunca.
(R: $\lambda_m \approx 500 \text{ nm}$)

c) Izračunajte temperaturu (u °C) na površini Sunca.

(R: $\theta = 5485$ °C)

Z112. Prema Rayleigh-Jeansovoj jednadžbi tijela bi i pri nižim temperaturama emitirala vidljivo i UV zračenje, odnosno sva bi tijela svijetlila i ne bi bilo mraka. Taj apsurdni rezultat je prozvan „ultraljubičastom katastrofom“.

a) Iz Planckova zakona zračenja crnog tijela

$$\rho_{\lambda} = \frac{8\pi hc}{\lambda^5 \left(e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1 \right)}$$

izvedite Rayleigh-Jeansovu jednadžbu

$$\rho_{\lambda} = \frac{8\pi k_B T}{\lambda^4}$$

koja vrijedi u području velikih valnih duljina ($\lambda \gg 1 \mu\text{m}$) pri čemu je ρ_{λ} spektralna gustoća energije, h Planckova konstanta, c brzina svjetlosti, k_B Boltzmannova konstanta i T termodinamička temperatura.

Pomoć: Taylorov red za eksponencijalnu funkciju glasi

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

- b) Zemlja se može aproksimirati crnim tijelom čija je prosječna temperatura 15 °C. Izračunajte ukupnu snagu zračenja koju emitira Zemlja površine $5,1 \cdot 10^8 \text{ km}^2$ u dalekom infracrvenom području (od 50 μm do 1000 μm) koristeći se Rayleigh-Jeansovom jednadžbom.

Pomoć: Egzitancija (M) je povezana sa spektralnom gustoćom energije putem izraza

$$M = \frac{c}{4} \int_{\lambda_A}^{\lambda_B} \rho_{\lambda} d\lambda$$

(R: $P = 1,02 \cdot 10^{16} \text{ W}$)

- c) Izračunajte ukupnu snagu zračenja koju emitira Zemlja površine $5,1 \cdot 10^8 \text{ km}^2$ i prosječne temperature $15 \text{ }^\circ\text{C}$ pri svim valnim duljinama.

(R: $P = 1,99 \cdot 10^{17} \text{ W}$)

Z113. Stefan-Boltzmannov zakon tvrdi da je ukupna količina energije koju idealno crno tijelo zrači pri svim valnim duljinama po jedinici površine i u nekoj jedinici vremena (egzitancija), direktno proporcionalna četvrtoj potenciji termodinamičke temperature

$$M = \sigma T^4$$

gdje je konstanta proporcionalnosti σ tzv. Stefan-Boltzmannova konstanta.

a) Izvedite Stefan-Boltzmannov zakon iz Planckove jednadžbe za spektralnu gustoću energije koja izražena preko frekvencije zračenja ν glasi

$$\rho_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3(e^{h\nu/k_B T} - 1)}$$

pri čemu su h i k_B Planckova i Boltzmannova konstanta, a T je termodinamička temperatura.

Pomoć: Egzitancija je povezana sa spektralnom gustoćom energije putem izraza

$$M = \frac{c}{4} \int_{\nu_A}^{\nu_B} \rho_\nu d\nu$$

Vrijednost tabličnog integrala je

$$\int_0^\infty \frac{z^3}{e^z - 1} dz = \frac{\pi^4}{15}$$

b) Izračunajte koliko iznosi vrijednost Stefan-Boltzmannove konstante.

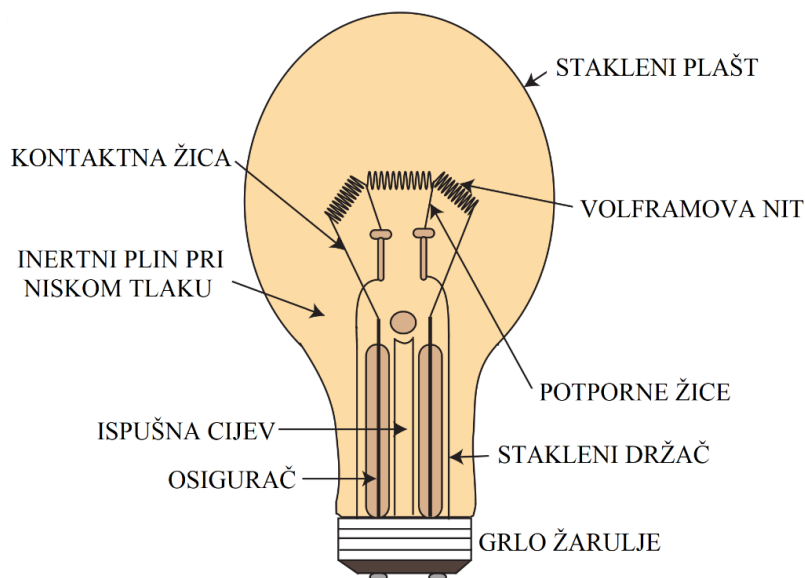
(R: $\sigma = 5,66 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$)

c) Kolika je temperatura na površini planeta Venere ako je egzitancija 1120 W m^{-2} ?

Pretpostavite da je Venera idealno crno tijelo.

(R: $\theta = 101,9 \text{ }^\circ\text{C}$)

Z114. Zračenje električne žarulje (slika 96.) koja radi na principu zagrijavanja tanke volframove niti može se aproksimirati zračenjem idealnog crnog tijela.



Slika 96. Unutrašnja konstrukcija električne žarulje s volframovom niti.

- a) U žarulji snage 40 W nalazi se namotana volframova nit valjkastog oblika dužine 43 cm i promjera 36 μm . Pretpostavite da je ukupna električna snaga žarulje jednaka ukupnoj snazi emitiranog zračenja s cijele površine volframove niti i odredite temperaturu niti, tj. temperaturu žarulje (u $^{\circ}\text{C}$).

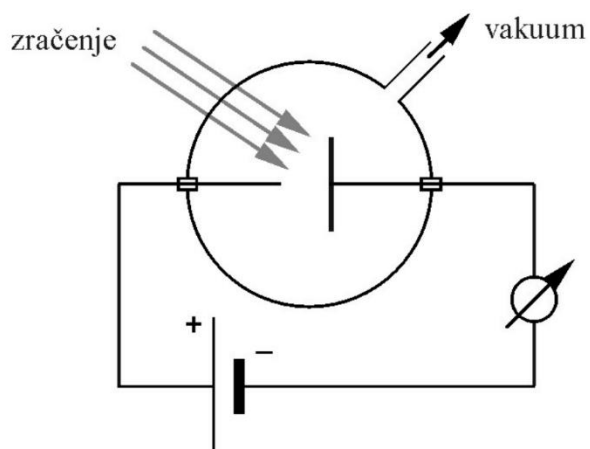
(R: $\theta = 1678,4^{\circ}\text{C}$)

b) Žarulje s volframovom niti su vjerojatno objekti najviše temperature u našim kućanstvima. Ako je temperatura žarne niti neke žarulje od 60 W 1927 °C, pri kojoj valnoj duljini se nalazi maksimum emisije zračenja te žarulje?

(R: $\lambda_m \approx 1,31 \mu\text{m}$)

c) U kojem području elektromagnetskog spektra se nalazi navedeni maksimum emisije zračenja?

Z115. Površina cezija postupno je obasjavana svjetlošću različitih valnih duljina (slika 97.) za koje su određeni naponi kojima su zaustavljeni emitirani fotoelektroni (tablica 36.).



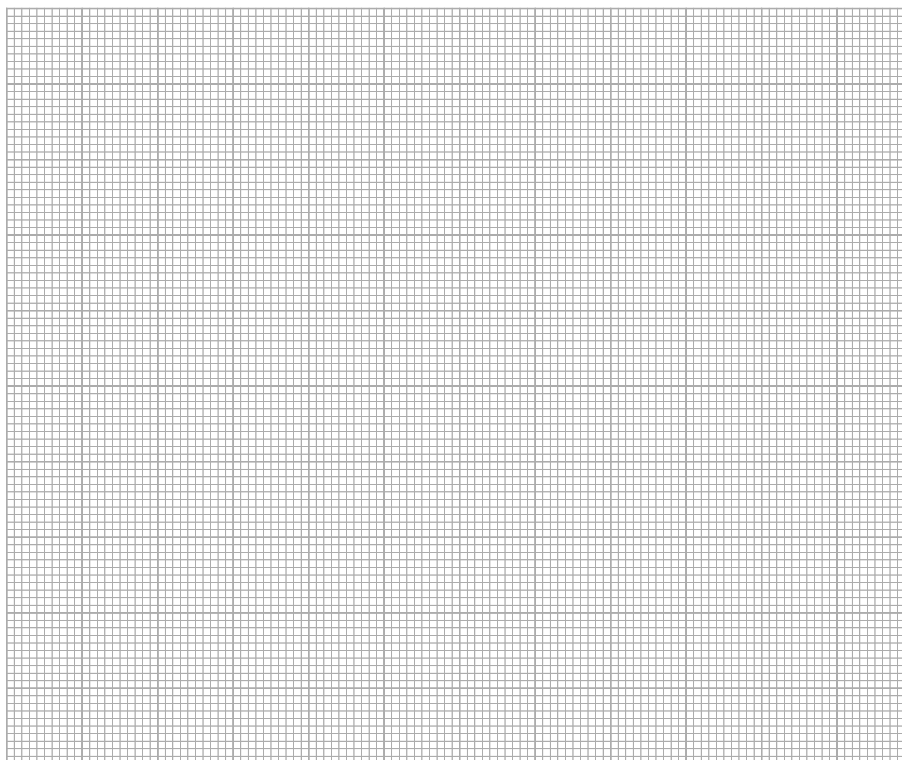
Slika 97. Shematski prikaz uređaja za proučavanje fotoelektričnog efekta.¹⁰

Tablica 36. Ovisnost napona kojim su zaustavljeni emitirani fotoelektroni o valnoj duljini upadnog zračenja.

λ / nm	U / V	$10^{-14} \nu$ / Hz
366	1,48	
405	1,15	
436	0,93	
492	0,62	
546	0,36	
579	0,24	

a) U potpunosti tablicu 36. s iznosima frekvencija upadnog zračenja i nacrtajte grafički prikaz ovisnosti $10^{-14} \nu$ o U .

¹ T. Cvitaš, *Fizikalna kemija* (rukopis u pripremi)



Slika 98. Ovisnost frekvencije upadnog zračenja o naponu prema tablici 36.

- b) Odredite vrijednost Planckove konstante i minimalnu frekvenciju upadnog zračenja koja će uzrokovati fotoelektrični efekt na tom metalu.

(R: $h = 6,70 \times 10^{-34}$ J s; $\nu_0 = 4,67 \times 10^{14}$ Hz)

c) Izračunajte u elektronvoltima minimalnu energiju potrebnu za odvajanje elektrona od površine cezija.

(R: $\Phi = 1,93 \text{ eV}$)

d) Izračunajte kinetičku energiju (u J) i brzinu elektrona emitiranog s površine cezija kad se ona obasja zračenjem valne duljine 300 nm.

(R: $E_k = 3,54 \times 10^{-19} \text{ J}$; $v = 8,82 \times 10^5 \text{ m s}^{-1}$)

Z116. Princip rada mnogih optičkih senzora kojima se može odrediti valna duljina upadnog zračenja temelji se na fotoelektričnom efektu.

- a) Da bi se laserom odvojio 1 mol elektrona od površine rubidija u fotoelektričnoj ćeliji potrebna je energija od 208,4 kJ. Ako su elektroni izbačeni s površine metala zaustavljeni naponom od 2,72 V, kolika je valna duljina zračenja lasera (u nm)?
(R: $\lambda = 254$ nm)

b) Izračunajte maksimalnu brzinu elektrona emitiranog s površine rubidija kad se ona obasja laserskim zračenjem iz prethodnog podzadatka.

(R: $v = 978127 \text{ m s}^{-1}$)

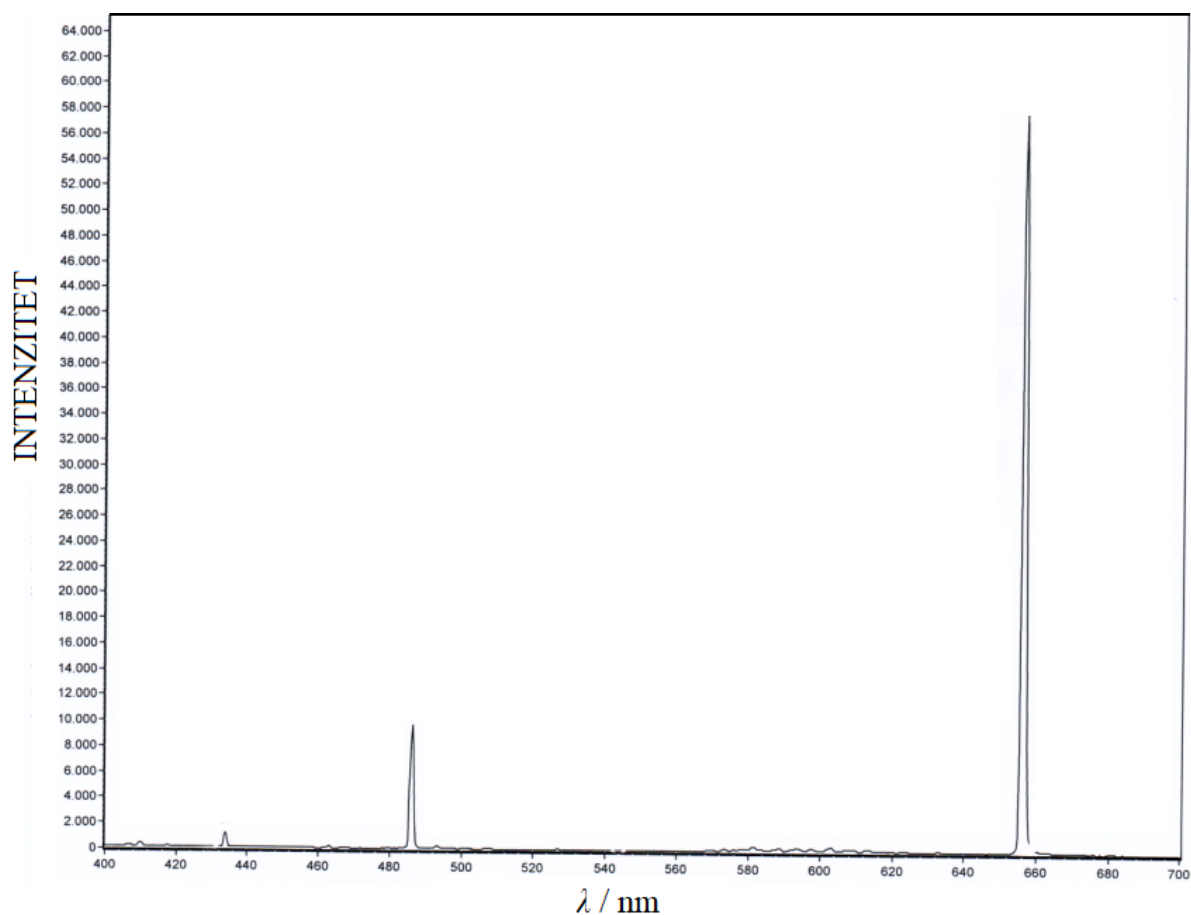
c) Osim rubidija i ostali metali se mogu upotrijebiti u fotoelektričnoj ćeliji za detekciju valne duljine zračenja. Izračunajte izlazni rad i odredite s površine kojeg alkalijskog metala (tablica 37.) će se emitirati elektron valne duljine $8,2 \text{ \AA}$, ako se površina tog metala obasja zračenjem valne duljine 295 nm .

Tablica 37. Vrijednosti izlaznog rada za alkalijske metale.

KEMIJSKI ELEMENT	Φ / eV
litij	2,93
natrij	2,36
kalij	2,29
cezij	1,95

(R: cezij)

Z117. Snimljen je emisijski spektar atoma vodika (slika 99.) te su asignirane linije Balmerove serije (tablica 38.).

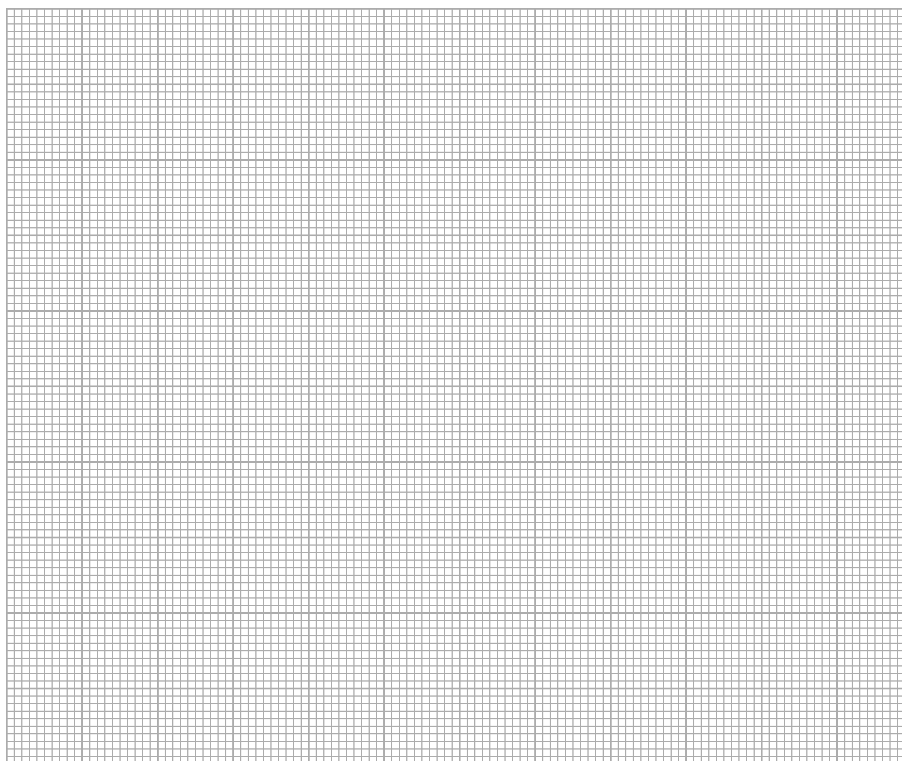


Slika 99. Emisijski spektar atoma vodika.

Tablica 38. Linije Balmerove serije asignirane prema spektru sa slike 99.

n'	λ / nm	$1 / (n')^2$	$\lambda^{-1} / \text{cm}^{-1}$
3	656,3		
4	486,2		
5	434,0		
6	410,1		
7	396,7		

- a) U potpunosti tablicu 38. s $1/(n')^2$ i λ^{-1} te nacrtajte grafički prikaz λ^{-1} naspram $1/(n')^2$.



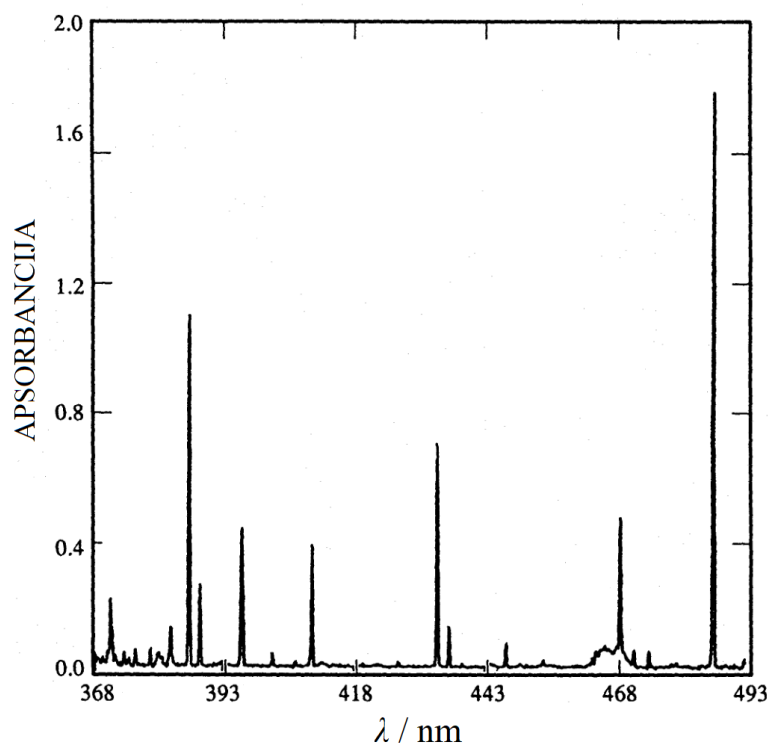
Slika 100. Valni brojevi linija Balmerove serije prema tablici 38.

- b) Odredite vrijednost Rydbergove konstante za atom vodika i iskažite je u cm^{-1} .
(R: $R_H = 109864 \text{ cm}^{-1}$)

- c) Izračunajte vrijednost energije ionizacije iz osnovnog stanja za atom vodika (u eV).
(R: $E_i = 13,6$ eV)

- d) Izračunajte valnu duljinu treće linije u Pfundovoj seriji ($n'' = 5$) u spektru atomskog vodika. U kojem području elektromagnetskog zračenja se nalazi ta linija?
(R: $\lambda = 3,73$ μm)

Z118. Planetarna maglica je nebeski objekt koji se sastoji od užarene ovojnice smjese plinova i plazme. Analizom emisijskih spektra poput onoga na slici 101. ustanovilo se da planetarne maglice sadrže atomizirani vodik.



Slika 101. Emisijski spektar planetarne maglice IC 1747.¹⁵

- a) Koja je valna duljina druge linije (β linije), a koja je valna duljina četvrte linije (δ linije) Balmerove serije u emisijskom spektru atoma vodika?
(R: $\lambda_{\beta} = 486,3$ nm i $\lambda_{\delta} = 410,0$ nm)

¹⁵ L. Stanghellini, J. B. Kaler, R. A. Shaw, *Astron. Astrophys.* **291** (1994) 604–612.

- b) Asignirajte β i δ liniju Balmerove serije u emisijskom spektru planetarne maglice IC 1747 tako da iznad odgovarajućih linija na slici 101. napišete grčko slovo β , tj. δ .

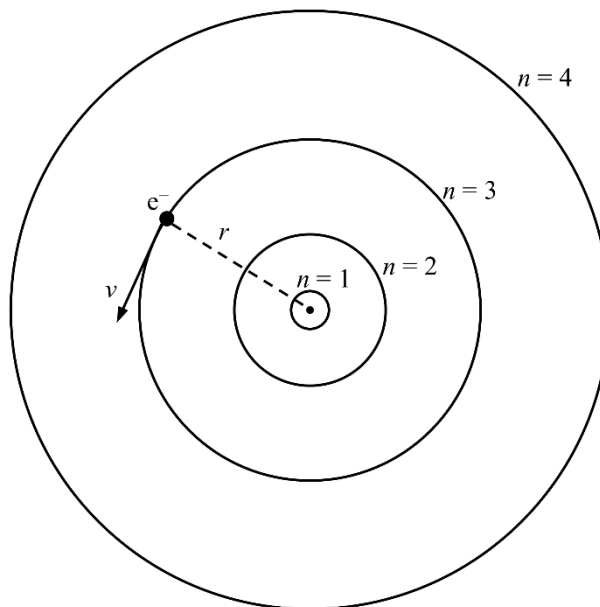
- c) Da bi se dogodio fotoelektrični efekt i detektiralo zračenje β i δ linije atoma vodika elektroda fotoćelije mora biti načinjena od kojeg metala iz tablice 39.?

Tablica 39. Vrijednosti izlaznog rada za neke metale.

METAL	Φ / eV
Au	5,1
Zn	4,3
Ca	2,8
K	2,3

(R: kalij)

Z119. Vodikov atom sastoji se od jednog protona naboja $+e$ i jednog elektrona naboja $-e$. Budući da je proton mnogo veće mase od elektrona, može se pretpostaviti da elektron kruži oko statičnog protona po određenim orbitama (slika 102.).



Slika 102. Kružne putanje elektrona oko protona u Bohrovu modelu atoma vodika.

- a) Na određenoj je putanji iznos centripetalne sile koja zakreće elektron jednaka iznosu sile elektrostatskog privlačenja jezgre i elektrona

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}$$

pri čemu je m masa elektrona, v brzina kojom se elektron kreće, r polumjer kružne putanje elektrona, a ϵ_0 permitivnost vakuuma. Uzevši u obzir Bohrov postulat da je kutna količina gibanja elektrona (L) kvantizirana i jednaka umnošku cjelobrojnog višekratnika (n) i Planckove konstante (h) podijeljene s 2π

$$L = mvr = \frac{nh}{2\pi}$$

izvedite Bohrov izraz za brzinu kojom se elektron kreće po orbitama

$$v = \frac{e^2}{2\epsilon_0 hn}$$

b) Izvedite Bohrov izraz za polumjer orbita po kojima se kreće elektron

$$r = \frac{\varepsilon_0 h^2 n^2}{\pi m e^2}$$

c) Izvedite Bohrov izraz za ukupnu energiju elektrona (E) koji se kreće po orbitama

$$E = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

Z120. Prema Bohrovu modelu atoma vodika elektron se nalazi u jednom od stacionarnih stanja određene energije krećući se određenom brzinom po kružnim putanjama određenoga polumjera.

a) Izračunajte brzinu elektrona na prvoj putanji u Bohrovu modelu atoma vodika.

(R: $v = 2,19 \times 10^6 \text{ m s}^{-1}$)

b) Izračunajte polumjer prve putanje u Bohrovu modelu atoma vodika.

(R: $r = 52,9 \text{ pm}$)

c) Izračunajte ukupnu energiju elektrona (u eV) koji se kreće po prvoj putanji u Bohrovu modelu atoma vodika.

(R: $E = -13,6 \text{ eV}$)

Z121. Louis de Broglie postavio je hipotezu da se česticama može pridružiti valna duljina čime je postavljen temelj valne prirode čestica.

a) Izračunajte valnu duljinu pridruženu zrcu pijeska mase 5 mg, ako se kreće brzinom od 1 mm h^{-1} .

(R: $\lambda = 4,77 \times 10^{-22} \text{ m}$)

b) Odredite valnu duljinu pridruženu elektronu koji se kreće brzinom od $6,6 \times 10^7 \text{ m s}^{-1}$.

(R: $\lambda = 10,75 \text{ pm}$)

- c) Može li se nekom metodom opaziti valna priroda zrnca pijeska i elektrona?
Objasnite odgovor.

Z122. Bohrov model atoma vodika uspješno je objasnio položaj linija u spektru tog atoma.

- a) Izračunajte brzinu elektrona na trećoj putanji u Bohrovu modelu atoma vodika.

(R: $v = 7,29 \cdot 10^5 \text{ m s}^{-1}$)

b) Na temelju de Broglieve hipoteze odredite valni broj (u cm^{-1}) pridružen elektronu koji se kreće brzinom od $2\,624\,400\text{ km h}^{-1}$ na trećoj putanji u Bohrovu modelu atoma vodika.

(R: $\lambda^{-1} = 1,00 \cdot 10^7\text{ cm}^{-1}$)

c) Izračunajte valnu duljinu druge linije u Lymanovoj seriji ($n'' = 1$) u emisijskom spektru atomskog vodika.

(R: $\lambda = 102,5$ nm)

d) U kojem području elektromagnetskog zračenja se nalazi ta linija?

Z123. Elektronska mikroskopija je vrsta mikroskopije koja za stvaranje slike koristi snop elektrona. Princip rada elektronskih mikroskopa temelji se na interakciji tih elektrona s jezgrom u atomima. Da bi došlo do interakcije valna duljina elektrona mora biti reda veličine promjera protona koji je $1 \cdot 10^{-15}$ m.

a) Kolika je brzina elektrona valne duljine $1 \cdot 10^{-15}$ m, ako zanemarite relativističku korekciju za masu elektrona?

(R: $v = 7,27 \cdot 10^{11}$ m s⁻¹)

b) Kolika je brzina elektrona valne duljine $1 \cdot 10^{-15}$ m, ako ne zanemarite relativističku korekciju za masu elektrona?

(R: $v = 299 \cdot 792 \, 433 \text{ m s}^{-1}$)

c) Može li elektron postići brzinu iz a podzadatka? Kolika je najveća brzina koju elektron može postići?

4.2. Heisenbergovo načelo neodredivosti

Z124. Vibracije neke dvoatomne molekule mogu se približno opisati kao titranje atoma oko ravnotežnih položaja.

a) Koliko načina vibriranja ima molekula vodika? Nacrtajte vibracijske modove molekule vodika.

b) Duljina veze u molekuli vodika iznosi 74 pm. Ako amplituda titranja atoma vodika, u molekuli vodika, oko ravnotežnog položaja atoma iznosi jednu desetinu duljine veze izračunajte na temelju načela neodredivosti valnu duljinu apsorpcije uslijed prijelaza među susjednim energijskim razinama. Pri tome pretpostavite da je kinetička energija vodika jednaka razlici u susjednim energijskim razinama.

(R: $\lambda = 13,1 \mu\text{m}$)

c) U kojem području elektromagnetskog zračenja se nalazi ta apsorpcijska vrpca?

Z125. Razvojem kvantne mehanike valjanost Bohrova modela atoma vodika postala je upitna. Na primjer, Bohrov model atoma vodika nije u skladu s Heisenbergovim načelom neodredivosti.

a) Izračunajte neodredivost količine gibanja elektrona koji se kreće jednoliko pravocrtno brzinom jednakom brzini elektrona koji se giba po drugoj putanji u Bohrovu modelu atoma vodika. Pretpostavite da mu je neodredivost brzine gibanja 10 % od vrijednosti same brzine. Radi jednostavnosti zanemarite relativističku korekciju za masu elektrona.

Pomoć: Neodredivost količine gibanja elektrona proporcionalna je neodredivosti brzine gibanja tog elektrona.

(R: $\Delta p = 9,96 \cdot 10^{-26} \text{ kg m s}^{-1}$)

- b) Na temelju prethodnog podzadatka izračunajte minimalnu neodredivost položaja elektrona koji se kreće po drugoj putanji u Bohrovu modelu atoma vodika, ako je neodredivost položaja tog elektrona jednaka neodredivosti položaja elektrona koji se giba jednoliko pravocrtno.

(R: $\Delta x = 529 \text{ pm}$)

c) Izračunajte polumjer druge putanje u Bohrovu modelu atoma vodika.

(R: $r = 212$ pm)

d) Usporedite neodredivost položaja elektrona iz b podzadatka s polumjerom druge putanje iz c podzadatka. Zašto Bohrov model atoma vodika nije u skladu s Heisenbergovim načelom neodredivosti?

4.3. Harmonički oscilator

Z126. Istezanje i skupljanje veze u molekuli $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ može se promatrati kao gibanje vodikovog atoma na opruzi, zbog činjenice da je ^1H atom značajno lakši od ^{35}Cl atoma.

a) Ako konstanta sile za $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ vezu iznosi $516,3 \text{ N m}^{-1}$ izračunajte period titranja.

(R: $T = 11,3 \text{ fs}$)

b) Duljina veze u molekuli $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ iznosi 127 pm. Ako amplituda titranja atoma vodika u molekuli $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ iznosi 40 % duljine veze izračunajte ukupnu energiju (u eV) takvog klasičnog harmoničkog oscilatora.

(R: $E = 4,16 \text{ eV}$)

c) Klasična ukupna energija titranja vodikovog atoma u molekuli $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ iznosi 4,16 eV. Odredite maksimalnu brzinu koju vodikov atom može postići promatranim titranjem.

(R: $v = 2,82 \times 10^4 \text{ m s}^{-1}$)

Z127. Jakost neke kovalentne veze može se kvantitativno opisati konstantom sile te veze.

- a) Ako molekula $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ apsorbira zračenje valnog broja 2170 cm^{-1} , koliko iznosi konstanta sile veze u toj molekuli? Relativna atomska masa ^{12}C je 12,00, a ^{16}O 15,99.

(R: $k_1 = 1904\text{ N m}^{-1}$)

b) Ako molekula $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ apsorbira zračenje valnog broja 1904 cm^{-1} , koliko iznosi konstanta sile veze u toj molekuli? Relativna atomska masa ^{14}N je 14,00, a ^{16}O 15,99.

(R: $k_2 = 1596\text{ N m}^{-1}$)

c) Veza u molekuli $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ ima konstantu sile 1904 N m^{-1} , dok veza u molekuli $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ ima konstantu sile 1596 N m^{-1} . Je li veza u molekuli $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ jača ili slabija od veze u molekuli $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$? Objasnite zašto je to tako.

Z128. Normirana valna funkcija za osnovno stanje harmoničkog oscilatora je

$$\psi_0 = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-bx^2}$$

pri čemu je x udaljenost čestice od ravnotežnog položaja, a b je koeficijent koji ovisi o masi čestice m i konstanti sile k

$$b = \frac{\pi}{h} \sqrt{km}$$

a) Odredite očekivanu odnosno prosječnu vrijednost položaja vodikovog atoma u odnosu na ravnotežni položaj u molekuli $^1\text{H}^{81}\text{Br}$ koja se nalazi u osnovnom stanju. Konstanta sile za vezu u molekuli $^1\text{H}^{81}\text{Br}$ iznosi 412 N m^{-1} . Relativna atomska masa ^1H je 1,008, a ^{81}Br 79,90.

(R: $\langle x \rangle = 0$)

- b) Izračunajte najvjerojatniji položaj vodikovog atoma u odnosu na ravnotežni položaj u molekuli $^1\text{H}^{81}\text{Br}$ koja se nalazi u osnovnom stanju.

(R: $x = 0$)

- c) Izračunajte molarnu energiju osnovnog vibracijskog stanja, tzv. molarnu energiju nulte točke (u kJ mol^{-1}) molekule $^1\text{H}^{81}\text{Br}$.

(R: $E_0 = 15,8 \text{ kJ mol}^{-1}$)

- d) Kojem stanju klasičnog harmoničkog oscilatora odgovara kvantnomehaničko osnovno vibracijsko stanje molekule $^1\text{H}^{81}\text{Br}$? Koliko iznosi ukupna energija klasičnog harmoničkog oscilatora u tom stanju?
(R: $E = 0$)

Z129. Modelom kvantnomehantičkog harmoničkog oscilatora moguće je objasniti apsorpciju elektromagnetskog zračenja kod kristala (npr. kod kristala natrijeva klorida). Atomi natrija u kristalnoj rešetki natrijeva klorida titraju oko svojih ravnotežnih položaja. Prilikom apsorpcije infracrvenog zračenja valne duljine $61,1 \mu\text{m}$ titrajući atomi prelaze iz nižeg u više energijsko stanje.

a) Izračunajte razliku u energiji (u eV) između susjednih energijskih razina atoma natrija koji oscilira u kristalu natrijeva klorida.

(R: $\Delta E = 0,0203 \text{ eV}$)

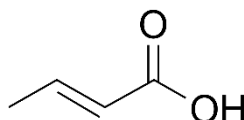
b) Koliko iznosi konstanta sile titrajućeg atoma natrija? Relativna atomska masa natrija iznosi 22,989.

(R: $k = 36,3 \text{ N m}^{-1}$)

- c) Prema klasičnom modelu harmoničkog oscilatora koliku potencijalnu energiju (u eV) ima atom natrija kada je pomaknut iz ravnotežnog položaja za 14 pikometara?
(R: $E_p = 0,0222$ eV)

4.4. Čestica u kutiji

Z130. Kod krotonske kiseline (slika 103.) elektron je delokaliziran u π orbitalama sustava konjugiranih veza. Prosječna duljina veze u krotonskoj kiselini iznosi 1,40 Å, a konjugirani sustav je dug četiri prosječne veze.



Slika 103. Struktura krotonske kiseline.

- a) Izračunajte valnu duljinu maksimuma apsorpcije u spektru krotonske kiseline koja odgovara prijelazu elektrona iz drugog u treće stanje jednodimenzijske kutije.
(R: $\lambda = 207$ nm)

b) U kojem području elektromagnetskog zračenja se nalazi taj apsorpcijski maksimum?

c) Valna funkcija za delokalizirani elektron u drugom energijskom stanju glasi

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$$

gdje je L duljina konjugiranog sustava u krotoskoj kiselini, a x je položaj elektrona. Izračunajte vjerojatnost nalaženja tog elektrona u srednjoj trećini kutije (otprilike između α i β ugljikovog atoma).

(R: $P = 19,5 \%$)

Z131. Plava otopina dobivena otapanjem natrija u tekućem amonijaku sastoji se od kationa natrija i elektrona „zarobljenih“ u šupljinama koje formiraju molekule otapala. Stanje takvog elektrona može se razmatrati modelom čestice u jednodimenzionalnoj kutiji.

a) Izračunajte razliku u energijama 4. i 5. razine (u eV) opisane kutije duljine 5 nm.

(R: $\Delta E = 0,135$ eV)

b) Razlika u energijama 84. i 85. razine za isti slučaj iznosi 2,54 eV. Kolika je valna duljina emitiranog zračenja prilikom prelaska elektrona između tih dviju razina?

(R: $\lambda = 488,1 \text{ nm}$)

c) Ako se promatrani elektron nalazi u osnovnom stanju kolika je vjerojatnost nalaženja elektrona izvan šupljine? Objasnite dobiveni rezultat.

(R: $P = 0$)

Z132. Ozrači li se ultra čista voda radioaktivnim γ -zračenjem velike energije, u vodi se generiraju kratkoživi elektroni koji su okruženi molekulama vode, tj. koji su hidratizirani. Takve hidratizirane elektrone moguće je razmatrati modelom čestice u jednodimenzionalnoj kutiji.

a) Pretpostavimo li da se elektron može kretati na udaljenosti od 6 \AA između dvije molekule vode, izračunajte njegovu ukupnu energiju (koja je jednaka kinetičkoj energiji) kada se elektron nalazi u osnovnom stanju.

(R: $E_1 = 1,04 \text{ eV}$)

b) Ako valna funkcija za hidratizirani elektron u osnovnom energijskom stanju glasi

$$\Psi_1 = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} x\right)$$

gdje je L udaljenost između dvije molekule vode, a x je položaj elektrona. Izračunajte prosječnu odnosno očekivanu vrijednost količine gibanja koju ima hidratizirani elektron u osnovnom stanju.

Pomoć: Izraz za operator količine gibanja je

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

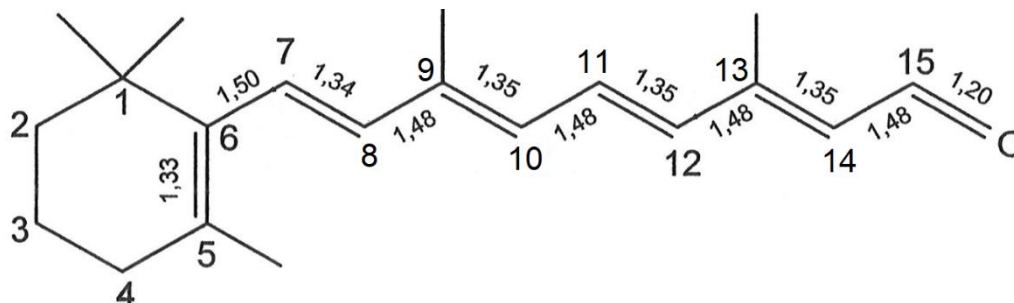
Vrijednost tabličnog integrala je

$$\int_a^b \sin(Cx)\cos(Cx)dx = -\frac{\cos^2(Cx)}{2C}$$

(R: $\langle p \rangle = 0$)

- c) Da li se hidratizirani elektron u osnovnom stanju kreće između molekula vode ili miruje? Objasnite odgovor.

Z133. Mrežnica ljudskog oka sadrži pigment rodopsin koji je osjetljiv na svjetlo. Ovaj pigment je građen od apoproteina opsina na koji je vezan retinal. Kemijska struktura molekule retinala prikazana je zajedno s duljinama veza na slici 104.



Slika 104. Struktura 11-*trans*-retinala s naznačenim ugljikovim atomima i duljinama veza izraženim u angstromima.

Sustav konjugiranih veza u 11-*trans*-retinalu proteže se od ugljikovog atoma 5 pa sve do kisikova atoma i nalazi se u jednoj ravnini pa je π elektrone u takvom sustavu moguće razmatrati modelom čestice u jednodimenzijskoj kutiji.

- a) Ako pretpostavite da se sve veze konjugiranog sustava u molekuli 11-*trans*-retinala nalaze na istom pravcu, kolika je duljina kutije?
(R: $L = 15,34 \text{ \AA}$)

b) Izračunajte valnu duljinu maksimuma apsorpcije u spektru 11-*trans*-retinala koja odgovara prijelazu elektrona iz šestog u sedmo energijsko stanje kutije.

(R: $\lambda = 597,2$ nm)

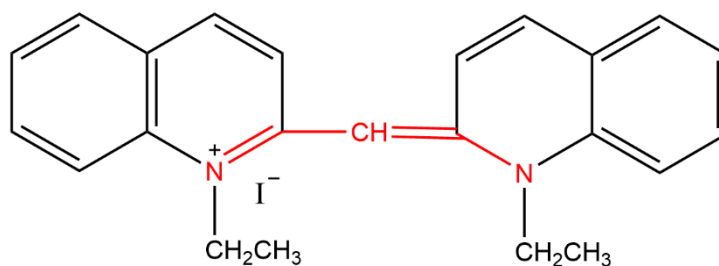
c) Valna funkcija za delokalizirani π elektron u trećem energijskom stanju glasi

$$\Psi_3 = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right)$$

gdje je L duljina konjugiranog sustava u 11-*trans*-retinalu, a x je položaj elektrona. Izračunajte vjerojatnost nalaženja tog elektrona u području između 7 i 12 ugljikovog atoma u molekuli 11-*trans*-retinala.

(R: $P = 46,4\%$)

Z134. Decinium-22 je kationski derivat organske tvari kinolina koji pokazuje farmakološku aktivnost u liječenju depresije. Plava boja otopine deciniuma-22 može se objasniti modelom čestice u jednodimenzionalnoj kutiji. Naime, sustav konjugiranih veza u molekuli deciniuma-22 (slika 105.) proteže se između dva dušikova atoma pa je π elektrone u takvom sustavu moguće razmatrati modelom čestice u kutiji.

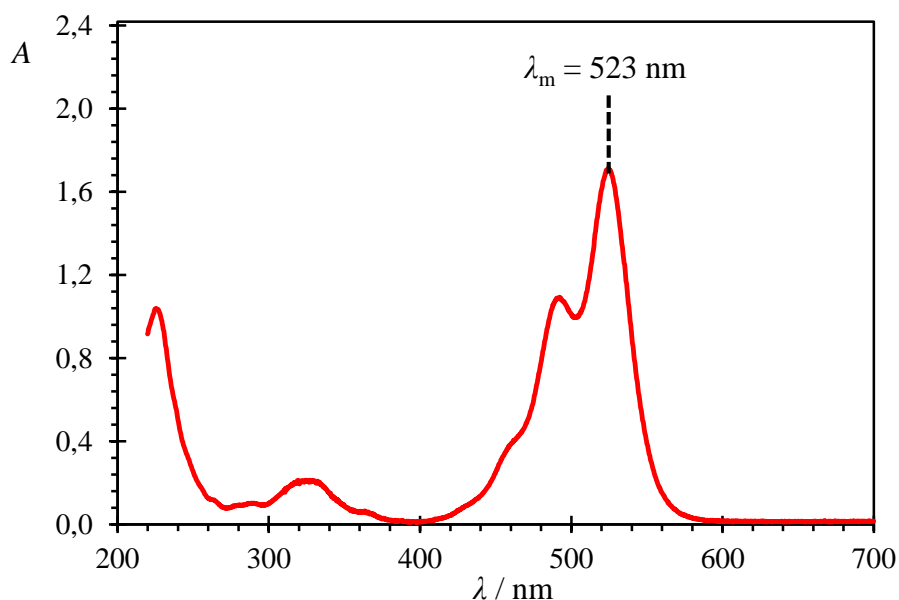


Slika 105. Kemijska struktura deciniuma-22 s crveno označenim konjugiranim sustavom π elektrona.

- a) Skicirajte energijski dijagram za prve četiri energijske razine za slučaj kada je samo jedan elektron delokaliziran u sustavu konjugiranih veza deciniuma-22. Napišite kakva je degeneracija svakog energijskog nivoa.

Slika 106. Energijski dijagram za π sustav elektrona kod deciniuma-22.

- b) Na energijskom dijagramu (slika 106.) smjestite šest π -elektrona koji se nalaze u konjugiranom sustavu deciniuma-22 u pripadajuća energijska stanja (orbitale) tako da dobijete osnovno stanje molekule deciniuma-22 (elektrone naznačite s \uparrow). Vodite brigu o tome da se u jednom stanju mogu naći maksimalno dva elektrona.
- c) U apsorpcijskom spektru deciniuma-22 (slika 107.) opaža se maksimum apsorpcije zračenja pri valnoj duljini od 523 nm. Navedeni maksimum odgovara prelasku elektrona između stanja najviše energije u kojem se nalazi barem jedan elektron i stanja najniže energije u kojem se ne nalazi niti jedan elektron.

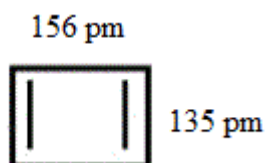


Slika 107. UV-Vis apsorpcijski spektar otopine deciniuma-22 u etanolu ($c = 1$ mmol dm⁻³) snimljen u kiveti debljine 1 cm.

Kolika je prosječna duljina veze u konjugiranom sustavu deciniuma-22 koji se sastoji od četiri veze?

(R: $l = 2,6 \text{ \AA}$)

Z135. Ciklobutadien je organska molekula planarne pravokutne geometrije (slika 108.) s duljinama stranica 156 pm i 135 pm.



Slika 108. Struktura i duljine veza u molekuli 1,3-ciklobutadiena.

Pretpostavimo da su četiri π -elektrona ciklobutadiena delokalizirana i da se svaki od tih elektrona može razmatrati kao čestica u dvodimenzijskoj kutiji veličine 156×135 pm².

- a) Skicirajte energijski dijagram za prve četiri energijske razine za slučaj kada je samo jedan elektron delokalizirani u ciklobutadienu. Napišite kakva je degeneracija svakog energijskog nivoa.

Slika 109. Energijski dijagram ciklobutadiena.

- b) Na energijskom dijagramu (slika 109.) smjestite četiri π -elektrona ciklobutadiena u pripadajuća energijska stanja (orbitale) tako da dobijete osnovno stanje ciklobutadiena (elektrone naznačite s \uparrow). Vodite brigu o tome da se u jednom stanju mogu naći maksimalno dva elektrona.
- c) Kolika je valna duljina apsorbiranog zračenja, maksimuma u apsorpcijskom spektru ciklobutadiena, prilikom prelaska elektrona između stanja najviše energije u kojem se nalazi barem jedan elektron i stanja najniže energije u kojem se ne nalazi niti jedan elektron?
(R: $\lambda = 79,8 \text{ nm}$)

Z136. Modelom čestice u kutiji može se zadovoljavajuće opisati promjena energije molekule plina u pumpi za bicikl kada stisnemo klip.

a) Kolika je degeneracija nivoa energije $3,47 \times 10^{-40}$ J za molekulu $^{16}\text{O}_2$ u pumpi kockastog oblika i duljine stranice 25 cm? Relativna atomska masa ^{16}O iznosi 15,99.

(R: $g = 6$)

b) Koliko nedegeneriranih energijskih razina postoji ispod energije $6,17 \times 10^{-21}$ J u pumpi kockastog oblika i duljine brida 25 cm? Relativna atomska masa ^{16}O iznosi 15,99.

(R: $n = 1,12 \times 10^{10}$)

- c) Ako se kisik u pumpi za bicikl kockastog oblika i duljine brida 25 cm komprimira pomicanjem klipa za 20 cm, za koliko elektronvolti će se promijeniti energija osnovnog stanja molekule $^{16}\text{O}_2$?

(R: $\Delta E = 2,5 \times 10^{-21}$ eV)