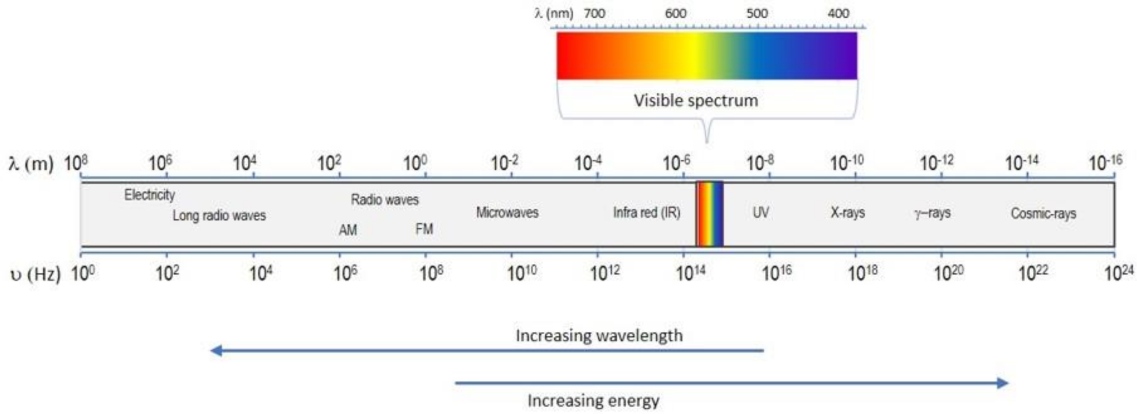
KVANTOVÁ MECHANIKA – ÚVOD

Důležité konstanty: $c = 2.99792458 \cdot 10^{8}$ m s^{-1}, $h = 6.62608 \cdot 10^{-34}$ J s, $N_A = 6.02214 \cdot 10^{23}$ mol^{-1}, $m_e = 9.1094 \cdot 10^{-31}$ kg, $e = 1.6022 \cdot 10^{-19}$ C, $R_H = 10973731.568508$ m^{-1}, $Ry = 2.1799 \cdot 10^{-18}$ J = 13.6 eV.

Úkol č. 1

Nakreslete a popište spektrum elektromagnetického záření. Pokuste se přiřadit typy spektroskopií k jednotlivým oblastem vlnových délek.

Řešení:



Úkol č. 2

Určete vlnovou délku záření o frekvenci 2.5 MHz. V jaké oblasti spektra elektromagnetického záření se pohybujeme? **[119.92 m]**

Řešení: Využijeme Plankova vztahu $\Delta E = h\nu = hc/\lambda$. Odpovídá to radiovým vlnám (AM)

Úkol č. 3

Jakou energii přenáší 5 molů fotonů elektromagnetického záření o vlnové délce 10 cm? **[5.98 J]**

Řešení: Využijeme Plankova vztahu $E_{foton} = h\nu = hc/\lambda$ a tak vypočteme energii jednoho fotonu. Pro jeden mol platí, že obsahuje N_A částic, pro pět molů to pak bude pětinásobek.

Úkol č. 4

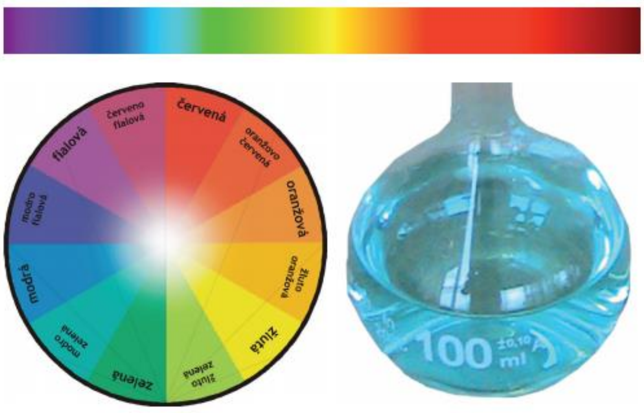
Jaká musí být frekvence fotonu, aby jeho energie způsobila rozbití vazby 1 molekuly Cl_2? Vazebná energie molekuly Cl_2 činí 247.2 kJ mol^{-1} **[6.1950·10^{14} Hz]**

Řešení: Pro rozbití vazby v molekule Cl_2 je potřeba dodat právě tolik energie, jako je její vazebná energie. Energie je v kJ mol^{-1}. Tuto energii převedeme na J vynásobením 10^3 a podělením N_A. Tím získáme energii pro jednu molekulu Cl_2. Pro výpočet frekvence využijeme Plankova vztahu: $\Delta E = h\nu$

Úkol č. 5

Roztok síranu měďnatého absorboval záření o energii 2.1014 eV. Kolik je to v J? Při jaké vlnové délce k této absorpci došlo a jak se nám bude roztok barevně jevit? **[590 nm]**

Řešení:



Energii v eV převedeme na J vynásobením elementárním nábojem. S využitím Plankova vztahu $\Delta E = h\nu = hc/\lambda$ vypočteme vlnovou délku. Vypočtená vlnová délka odpovídá absorpci oranžového světla, jehož doplňková barva (ta kterou my vidíme) je modrá. Čili roztok se nám bude jevit modře. Pozn.: Intenzita zabarvení je dána koncentrací dané látky, a to přímo úměrně, ba dokonce i lineárně. Tuto závislost popisuje Lambertův-Beerův zákon, o kterém se více dozvíte v přednáškách z analytické chemie.

Úkol č. 6

Jaká je základní energie elektronu v jednorozměrné potenciálové jámě (nekonečně hluboké) o rozměru 1 m a v jámě velikosti rozměru atomu, který činí 9.6957 Å? **[pro 1 m: $3.76\cdot10^{-19}$ eV, pro rozměr jádra: 0.3999 eV]**

Řešení: v základním stavu je $n = 1$, m je hmotnost částice (elektronu), L je velikost jámy. Jednotka Å sice není SI, ale v chemii se celkem běžně používá – platí 1 Å = 10^{-10} m. Pro výpočet využijeme vztahu pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu:

$$E_n = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

Úkol č. 7

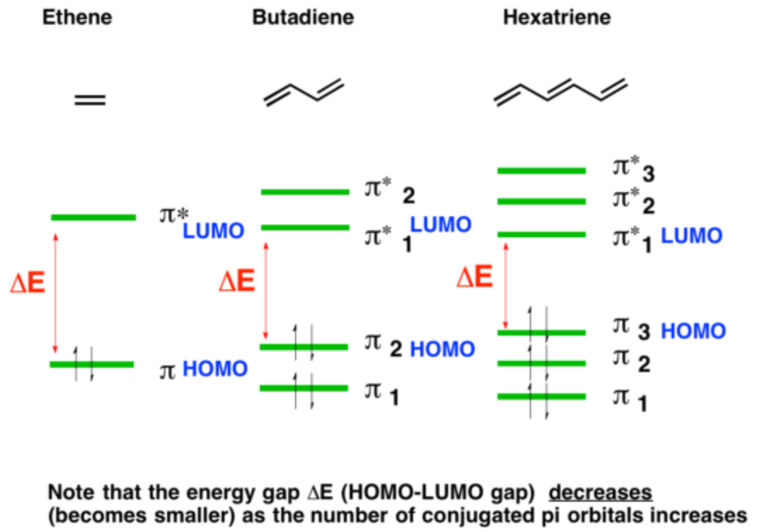
Vypočtěte vlnovou délku [v nm] záření absorbovaného při přechodu HOMO–LUMO v molekule a) ethenu, b) buta-1,3-dienu, c) hexa-1,3,5-trienu a vlnovou funkci aproximujte funkcemi pro částici v jáme o velikosti 1.5 Å pro ethen, 6.5 Å pro buta-1,3-dien a 9.5 Å pro hexa-1,3,5-trien. Jednotlivé situace znázorněte pomocí obrázků. Jaké trendy v rámci vlnových délek a energií můžeme pozorovat s rostoucím řetězcem? **[a) 24.7 nm, b) 278.6 nm, c) 425.1 nm]**

Řešení: Vyjdeme z Planckova vztahu $\Delta E = h\nu = hc/\lambda$, kde ΔE představuje rozdíl $E_{LUMO} - E_{HOMO}$. Dále opět použijeme vztah pro částici v nekonečně hluboké potenciálové jámě: $E_n = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$, kde n = 1, 2, ...

a) pro ethen bude n pro HOMO rovno jedné a pro LUMO rovno dvěma. Situace pro ethen tedy bude vypadat následovně:

LUMO: $E_2 = \frac{2^2h^2}{8mL^2}$, HOMO: $E_1 = \frac{1^2h^2}{8mL^2}$, $\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} = \frac{3h^2}{8mL^2}$

$\Delta E = h\nu = hc/\lambda$ .... $\lambda = hc/\Delta E = \frac{8mL^2}{3h^2}hc = \frac{8mL^2}{3h}c$



Úkol č. 8

Johann Jakob Balmer v roce 1885 publikoval matematickou studii, ve které zanalyzoval 4 spektrální čáry atomu vodíku (λ = 6562.1; 4860.74; 4340.1; 4101.2 Å), které pozoroval Anders Ångstrom. Jedná se o přechody na druhou nejnižší energetickou hladinu. Jaká by z těchto dat vyšla konstanta, kterou dnes nazýváme Rydbergova konstanta pro vodík? **[10 972 200 m⁻¹]**

Řešení: Vyjdeme ze vztahu, kde m je v Balmerově sérii rovno dvěma a n je rovno třem, čtyřem, pěti a šesti. Veličina $\tilde{\upsilon}$ se nazývá vlnočet a běžně se s ní setkáte v infračervené spektroskopii.

$$\tilde{\upsilon} = \frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

Úkol č. 9

Jaké nejkratší (tj. $n_2 = \infty$) a nejdelší vlnové délky lze očekávat, že budou pozorovatelné v Lymanově, Balmerově a Paschenově spektrální sérii? Použijte R_H z konstant. **[L: λ_1 = 121.5 nm, λ_2 = 91.0 nm, B: λ_1 = 656.1 nm, λ_2 = 364.5 nm, P: λ_1 =1874.1 nm, λ_2 = 820.1 nm]**

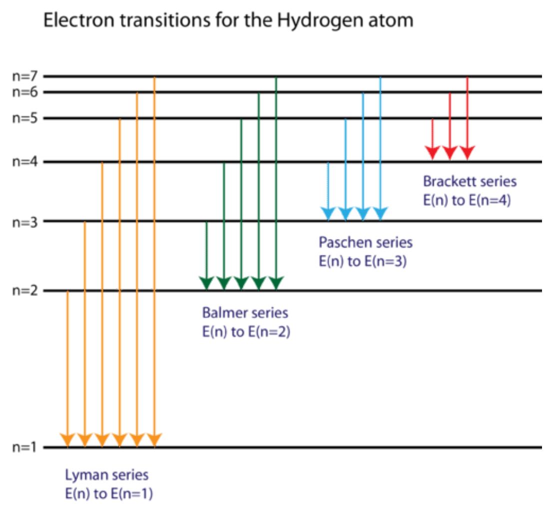
Řešení: Vyjdeme ze vztahu:

$$\tilde{\upsilon} = \frac{1}{\lambda} = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

V Lymanově sérii je m rovno jedné a n je pro nejdelší vlnovou délku rovno dvěma; pro nejkratší je rovno ∞.

V Balmerově sérii je m rovno dvěma a n je pro nejdelší vlnovou délku rovno třema; pro nejkratší je rovno ∞.

V Lymanově sérii je m rovno třem a n je pro nejdelší vlnovou délku rovno čtyřem; pro nejkratší je rovno ∞.



Úkol č. 10

Vypočtěte energii základního stavu vodíku a jeho ionizační potenciál. **[−13.6 eV, IP = 13.6 eV]**

Řešení: Pro vodík je $Z = 1$ a n v základním stavu je rovněž rovno jedné. Poté využijeme vztahu:

$$E_n = -\frac{Ry\,Z^2}{n^2}$$

Ionizační potenciál IP je pak dán: (platí $\frac{1}{\infty^2} = 0$)

$$\mathrm{IP} = E_\infty - E_n = -\frac{RyZ^2}{\infty^2} - \left(-\frac{RyZ^2}{n^2}\right)$$

Úkol č. 11

Spočítejte ionizační potenciály (v eV) iontů He^{+} a C^{5+} v jejich základních elektronových stavech. **[IP (He^{+}) = 54.4 eV, IP (C^{5+}) = 489.6 eV]**

Řešení: Ionizační potenciál IP je pak dán:

$$\mathrm{IP} = E_{\infty} - E_n = -\frac{RyZ^2}{\infty^2} - \left(-\frac{RyZ^2}{n^2}\right)$$

Pro He^{+} je $Z = 2$, $n = 1$ (v základním stavu) a pro C^{5+} je $Z = 6$, $n = 1$ (v základním stavu)