Kvantna kemija

Seminar

6.6.2025.

1. Izračunajte energiju nulte točke harmonijskog oscilatora koji se sastoji od čestice mase 2,33 · 10^{-26} kg, a konstanta sile iznosi 155 N m^{-1}.

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu$$

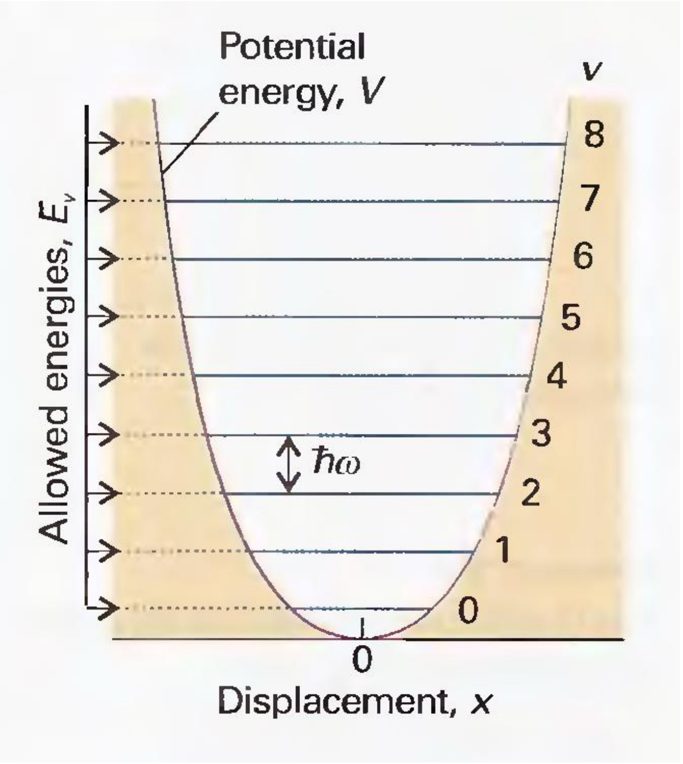
Dopuštene energijske razine najniža E ne može biti nula (Kvantno.mehanički pristup)

n = 0, 1, 2...

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Klasična frekvencija H.O.

Iz klasičnog pristupa gdje potencijalna energija može imati vrijednost nula



Energija nulte točke: $E(n = 0)$

$$E(0) = \frac{1}{2} h \cdot \nu$$

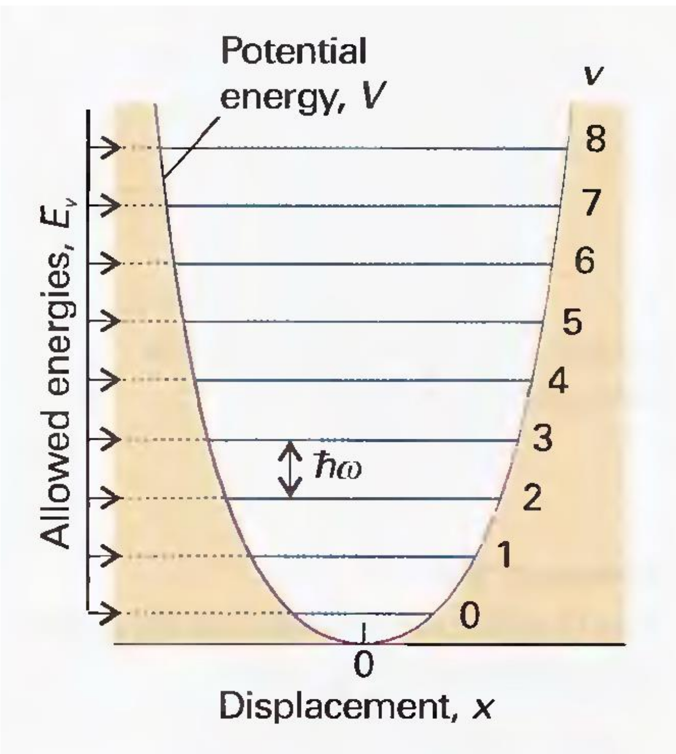
$$E(0) = \frac{1}{2} h \cdot \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$= \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J\ s}}{4\pi} \cdot \sqrt{\frac{155\ \mathrm{N\ m^{-1}}}{2{,}33 \cdot 10^{-26}\ \mathrm{kg}}}$$

$\mathrm{N} = \mathrm{kg\ m\ s^{-2}}$

$$E(0) = 4{,}3 \cdot 10^{-21}\ \mathrm{J}$$

2. Odredite konstantu sile harmonijskog oscilatora koji se sastoji od čestice mase 1,33 · 10^{-26} kg, a susjedni energijski nivoi su razmaknuti za 4,82 · 10^{-21} J.



Svi nivoi su jednako razmaknuti kod H.O.

$$\Delta E = h \cdot v$$

$$E(0) = \frac{1}{2} h \cdot \nu$$

$$E(1) = \frac{3}{2} h \cdot \nu$$

...

Frekvencija zračenja koje uzrokuje prijelaz između 2 susjedna nivoa

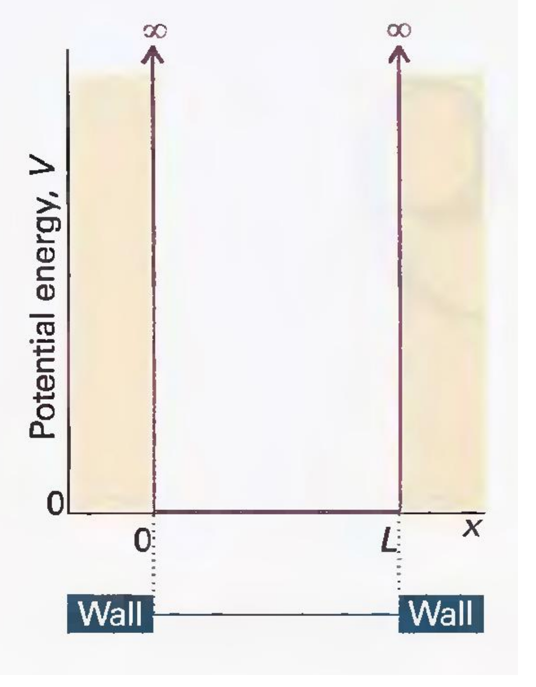
$$\nu = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{m}} \Rightarrow k = \nu^2 \cdot 4\pi^2 \cdot m$$

$$k = 27{,}8 \text{ N m}^{-1}$$

3. Kojoj valnoj duljini odgovara prijelaz elektrona iz drugog u treće stanje jednodimenzijske kutije duge 5,60 Å?

$$E(n) = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$

1D kutija



n = 1, 2...

n'' = 2

n' = 3

L = 5,60 Å

$$\Delta E = E(n') - E(n'') = E(3) - E(2)$$

$$\Delta E = \frac{h^2}{8mL^2} \cdot \left(3^2 - 2^2\right) = 5\frac{h^2}{8mL^2}$$

$$\Delta E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{8 \cdot m \cdot L^2 \cdot c}{5 \cdot h} = 2{,}07 \cdot 10^{-7}\ \text{m} = 207\ \text{nm}$$

masa elektrona

4. Izračunajte molarnu energiju nulte točke za elektron u području: $0 < x/\mathrm{nm} < 1$ i $0 < y/\mathrm{nm} < 0,1$.

$$E(n_x, n_y) = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$$

2D kutija

$L_x = 1$ nm
$L_y = 0,1$ nm

Nulta točka – najniža en. razina: za 2-D kutiju $n_x = n_y = 1$

$E(1,1)$ – energija nulte točke

$E_m(1,1) = E(1,1) \cdot N_A$ – molarna energija nulte točke

Avogadrova konstanta: $6,022 \cdot 10^{23}\ \mathrm{mol}^{-1}$

$$E_{\mathrm{m}}(1,1) = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2}\right) \cdot N_{\mathrm{A}}$$

$$= 3{,}66 \cdot 10^6 \ \mathrm{J\ mol^{-1}}$$

5. Koliko nedegeneriranih nivoa postoji ispod energije $k_B T$ pri 290 K za molekulu O_2 u kocki brida 1 cm?

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$$

3D kutija

$L_x = L_y = L_z = 1$ cm

$$m(\mathrm{O_2}) = M_r(\mathrm{O_2}) \cdot u$$
$$= 32 \cdot u$$

Unificirana atomska jedinica mase

$u = 1{,}6605 \cdot 10^{-27}$ kg

Degeneracija: stanja s istom energijom, ali različitom valnom funkcijom $\rightarrow$ različiti kvantni brojevi n_x, n_y i n_z – barem 1 različit u odnosu na ostala 2 $\rightarrow$ više kombinacija za isti iznos energije

Nedegenerirana su ona stanja gdje je energetskom nivou pridružena samo jedna valna funkcija $\rightarrow$ samo jedna moguća kombinacija kvantnih brojeva – ne razlikujemo n_x, n_y i n_z - svi kvantni brojevi jednaki

Nedegenerirana stanja

1, 1, 1
2, 2, 2
3, 3, 3
...
n, n, n

$n = ?$

$$E(n,n,n)=\frac{h^2}{8mL^2}(n^2+n^2+n^2)=\frac{3h^2}{8mL^2}\cdot n^2$$

$$E(n,n,n)=k_B T$$

Boltzmanova konstanta;
k_B = 1,381·10^{-23} J K^{-1}

$$n=\sqrt{\frac{8mL^2k_BT}{3h^2}}$$

J = N·m = kg m s^{-2} · m = kg m^2 s^{-2}

$$n=3{,}6\cdot 10^8$$

Broj nedegeneriranih nivoa

6. Kolika je degeneracija energijske razine za česticu mase *m* u kocki brida *L*?

$$101\frac{h^2}{8m \cdot L^2}$$

Koliko ima mogućih kombinacija n_x, n_y i n_z da bi se dobio navedeni iznos energije?

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

Čestica u kocki

$$L_x = L_y = L_z = L$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 101$$

Metoda pokušaja i pogreške $\rightarrow$ ako je npr. prvi broj 10 (kvadrat 100), onda zbroj druga 2 kvadrata mora biti 1 što nije moguće jer niti jedan kv. broj ne može biti nula $\rightarrow$ znači da je max. $n = 9$

n_x	n_y	n_z
9	4	2
8	6	1
7	6	4
6	8	1

ponavljanja

Ako probamo s 2 jednaka kvantna broja ili 1 različitim, ne možemo dobiti zbroj 3 kvadrata

Konačno: 3 seta brojeva
Da ne ispisujemo svaku pojedinu kombinaciju: svaki set od 3 broja se može zapisati na 6 načina, odnosno 6 različitih redoslijeda (3!) = ukupno 18 kombinacija

Npr.:
9 4 2
9 2 4
4 2 9
4 9 2
2 9 4
2 4 9

Degeneracija naveden en. razine iznosi 18