

# Química Teórica e Computacional

Departamento de Química

Universidade de Coimbra

2012/2013

Aula 1

1. Um potencial de compensação de 2.38 V é suficiente para que deixe de haver emissão de fotoelectrões quando potássio metálico é incidido por um feixe de frequência de  $1.13 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ . Determine a função trabalho do metal. Qual a frequência mínima para emissão de fotoelectrões.

Partindo da equação  $E_{\text{radiação}} = h\nu = W + E_c(\text{electrões})$ , tem-se

$$\begin{aligned} W &= h\nu - E_c \\ &= 4.136 \times 10^{-15} \text{ eV s} \times 1.13 \times 10^{15} \text{ s}^{-1} - 2.38 \text{ eV} \\ &= 2.29 \text{ eV} \end{aligned}$$

Note que o potencial  $V = 2.38 \text{ V}$  é convertido para energia através da multiplicação por  $e$  (carga do electrão). Ou seja, passa de  $2.38 \text{ V}$  para  $2.38 \cdot e \text{ V}$ . Em alternativa poderíamos utilizar unidades SI. Para isso é necessário verificar que  $J = V \times C$  com  $C$  a carga em Coulomb, que no caso do electrão é  $e = 1.602176 \times 10^{-19} \text{ C}$ . Desta forma:  $E_c = 2.38 \text{ V} \times 1.602176 \times 10^{-19} \text{ C} = 3.81 \times 10^{-19} \text{ J}$  (recordar que  $J = V \cdot C$ ).

A frequência mínima,  $\nu_0$ , está relacionada com a função trabalho através da relação:  $W = h\nu_0$ .

$$\nu_0 = W/h = 2.29 \text{ eV} / 4.136 \times 10^{-15} \text{ eV s} = 0.55 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

2. Determine o comprimento da onda de de Broglie associado ao electrão no nível fundamental do átomo de hidrogénio cuja energia é  $E = -13.6 \text{ eV}$ . (Note-se que  $-13.6 \text{ eV}$  corresponde à energia de ligação do electrão ao núcleo. Desta forma, e pelo teorema de Virial,  $E_p = -2 \times E_c$  e  $E_c + E_p = E$ , logo  $E_c = 13.6 \text{ eV}$ ).

Sabendo que o comprimento de onda de de Broglie é dado por  $\lambda = h/p$  com  $m$  a massa da partícula e  $p$  o momento, teremos de determinar  $p$  a partir da

energia:

$$E_c = \frac{p^2}{2m_e}$$
$$p = \sqrt{2m_e E_c}$$

Convertendo 13.6 eV em unidades SI temos  $E_c = 13.6 \times 6.02176565 \times 10^{-19} \text{ J}$ , logo  $p = 1.99243 \times 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1}$ , e  $\lambda = h/p = 6.62606896 \times 10^{-34} \text{ J s} / 1.99243 \times 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1} = 3.3256 \times 10^{-12} \text{ m}$ .

3. Calcule o comprimento de onda de De Broglie para um fotoelectrão que é produzido quando um feixe radiação com 140 nm atinge zinco metálico ( $W_{\text{Zn}} = 3.63 \text{ eV}$ ).

Partindo da expressão do efeito fotoeléctrico,  $E_c = h\nu - W$ , dever-se-á converter o comprimento de onda em frequência,  $\nu = c/\lambda = (299792458 \text{ m s}^{-1})/(140 \times 10^{-9} \text{ m}) = 2.1413747 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ , enquanto que  $W = 2.38 \times 1.602176565 \times 10^{-19} \text{ J}$ . Desta forma,  $E_c = 1.03 \times 10^{-18}$ ,  $p = \sqrt{2m_e E_c} = 1.37 \times 10^{-24}$  e  $\lambda = h/p = 4.82 \times 10^{-10} \text{ m}$ .