Квантовая механика

Решение

1.

$$n\lambda = 2\pi r,$$

$$\frac{h}{p} = \frac{2\pi r}{n}$$

$$p = \frac{nh}{2\pi r} = \frac{n\hbar}{r}$$

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2}{2mr^2}$$

2. В молекуле аннулена – 18 π-электронов. Они занимают уровни с $n = 0, \ldots, 4$. Первый незаполненный уровень – 5-ый.

3. В молекуле аннулена – 18 связей C–C. Радиус окружности найдем как сумму длин связей, деленную на 2π:

$r = 18{\cdot}1.4 / 2\pi = 4.01$ Å.

Наибольшая длина волны соответствует переходу с высшего заполненного уровня на низший вакантный:

$$\Delta E = E_5 - E_4 = \frac{9\hbar^2}{2mr^2} = \frac{9(1.05\cdot10^{-34})^2}{2\cdot9.11\cdot10^{-31}\cdot(4.01\cdot10^{-10})^2} = 3.39\cdot10^{-19}\ \text{Дж}$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{6.63\cdot10^{-34}\cdot3.00\cdot10^{8}}{3.39\cdot10^{-19}} = 5.87\cdot10^{-7}\ \text{м} = 587\ \text{нм}$$

4. Для частицы в квадратном ящике будут заняты следующие уровни:

(1,1); (2,1) = (1,2); (2,2); (3,1) = (1,3); (3,2) = (2,3), (4,1) = (1,4).

На высших двух уровнях, по правилу Хунда должно быть по одному неспаренному электрону, что уже противоречит опыту: аннулен – не радикал. Низший вакантный уровень имеет квантовые числа (3,3).

Длину стороны квадрата найдем через периметр как сумму длин связей, деленную на 4:

$l = 18{\cdot}1.4 / 4 = 6.3$ Å.

Наибольшая длина волны соответствует переходу с высшего заполненного уровня на низший вакантный:

$$\Delta E \quad E_{3,3} - E_{4,1} \quad \frac{h^2}{8ml^2}\left(3^2 + 3^2 - 4^2 - 1^2\right) = \frac{(6.63\cdot10^{-34})^2}{8\cdot9.11\cdot10^{-31}\cdot(6.3\cdot10^{-10})^2} = 1.52\cdot10^{-19}\ \text{Дж}$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{6.63\cdot10^{-34}\cdot3.00\cdot10^{8}}{1.52\cdot10^{-19}} = 1.31\cdot10^{-6}\ \text{м} = 1310\ \text{нм}$$

Это примерно в два раза больше реального значения. Для [18]аннулена модель «частица в ящике» не годится.