

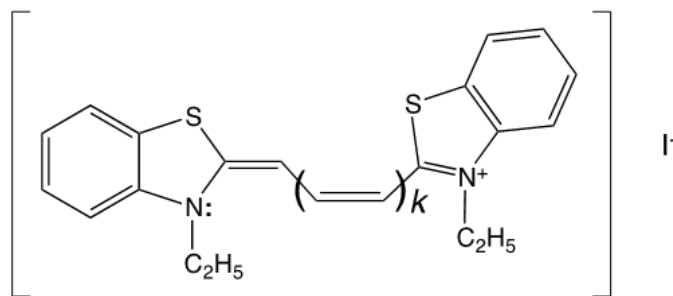
Übungsblatt Nr. 9

Aufgabe 1: Cyaninfarbstoffe

Das quantenmechanische Modell eines Teilchens in einem eindimensionalen Kasten kann zur Beschreibung des Absorptionsspektrums eines konjugierten π -Elektronensystems benutzt werden.

- Geben Sie den Hamiltonoperator für ein Teilchen in einem eindimensionalen Kasten der Länge L an.
- Zeigen Sie, dass die Wellenfunktionen $\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ Eigenfunktionen des Hamiltonoperators sind mit den Eigenwerten $E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8mL^2}$ und $n = 1, 2, 3, \dots$.

Im weiteren Verlauf dieser Aufgabe betrachten wir den folgenden Cyaninfarbstoff:



In unserem Farbstoff hat k den Wert 2. Wir nehmen eine mittlere Bindungslänge von $l = 1.4 \text{ \AA}$ an. Die Gesamtlänge des Kastens L ist dann $L = Z \cdot l$ wobei $Z = 8$ die Anzahl der Bindungen des konjugierten π Systems ist.

Hinweis: Das konjugierte π -Elektronensystem geht vom Stickstoffatom des linken Ringsystems zum Stickstoffatom des rechten Ringsystems.

- Die Anzahl der Elektronen im π System ist gleich 10. Erklären Sie diese Zahl.
- Zeichnen Sie ein Energiediagramm der sechs tiefsten Zustände und fügen Sie die π -Elektronen des Farbstoffes unter Berücksichtigung des Pauliprinzipis zu.
- Berechnen Sie die Grundzustandsenergie des Farbstoffes. Geben Sie den analytischen Ausdruck sowie den numerische Wert in SI Einheiten an.
- Zeichnen Sie das Energiediagramm für den ersten angeregten Zustand des Farbstoffes.
- Berechnen Sie die Anregungsenergie vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand in SI Einheiten. Welcher Wellenlänge entspricht diese Energie?