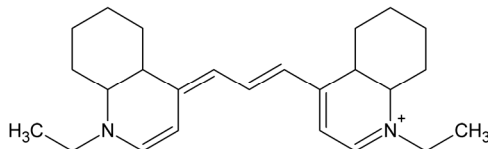


Übungsblatt 3 (zu bearbeiten bis 09.11.2011)**Aufgabe 1: Farbstoffmoleküle**

Auf Systeme konjugierter Doppelbindungen in organischen Farbstoffmolekülen lässt sich näherungsweise das Modell des Elektrons im eindimensionalen Kastenpotential anwenden (vgl. H. Kuhn, Helv. Chim. Acta 31 (1948) 1441).



a) Berechnen Sie nach diesem Modell die Energiedifferenzen zwischen dem höchsten besetzten (HOMO) und dem niedrigsten unbesetzten Energieniveau (LUMO) bei dem abgebildeten Cyanin-Farbstoff, dessen konjugiertes System sich über eine Länge von 1.668 nm erstreckt. Beachten Sie dabei, dass jedes Energieniveau mit zwei Elektronen besetzt wird und berücksichtigen Sie nur die am konjugierten System beteiligten 12 Elektronen.

b) Die langwelligste Adsorptionsbande des betrachteten Farbstoffs entsteht dadurch, dass ein Elektron aus dem höchsten besetzten Energieniveau (HOMO) in das niedrigste unbesetzte Energieniveau (LUMO) angeregt wird. Welcher Lichtwellenlänge entspricht die berechnete Differenz der Energieniveaus? Vergleichen Sie mit dem experimentellen Wert für die Lage des Absorptionsmaximums von $\lambda_{\text{exp}} = 710 \text{ nm}$ und schätzen Sie die Farbe des Stoffes ab!

Aufgabe 2: Potentialkasten als Modell der chemischen Bindung

Die Vereinigung zweier eindimensionaler Potentialkästen (mit unendlich hohen Wänden) zu einem größeren Kasten stellt ein einfaches Modell der chemischen Bindung dar, da bei diesem Vorgang die kinetische Energie und damit die Gesamtenergie des Systems sinkt.

a) Berechnen Sie die "Bindungsenergie" zwischen zwei gleichartigen Potentialkästen von jeweils 2 Å Länge, die sich zu einem Kasten der Länge 3 Å verbinden (Überlapp von 1 Å). Einer der Kästen enthält ein Elektron im Grundzustand, der andere Kasten ist unbesetzt.

b) Vergleichen Sie den so berechneten Wert mit typischen Bindungsenergien für kovalente Bindungen.

Aufgabe 3: Impuls- und Ortsunschärfe im Potentialkasten

Ein Elektron befinde sich in einem eindimensionalen Potentialkasten der Länge 10 Å.

a) Wie groß ist die Impulsunschärfe des Elektrons? Gehen Sie bei der Lösung der Aufgabe von den Energieeigenwerten des Elektrons im Kastenpotential aus!

b) Um den Aufenthaltsort des Elektrons genauer festzulegen, wird der Kasten auf 1 Å verkleinert. Um welchen Faktor erhöht sich die Impulsunschärfe?

Aufgabe 4: Harmonischer Oszillator und Molekülschwingungen

Die Kraftkonstanten von H^{35}Cl und D^{35}Cl sind annähernd gleich groß. Bei H^{35}Cl beträgt die Energiedifferenz zwischen dem Schwingungsgrundzustand und dem ersten angeregten Schwingungszustand 2885 cm^{-1} . Wie groß ist die entsprechende Energiedifferenz bei D^{35}Cl ?