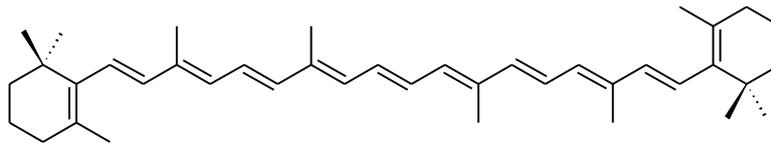


Besprechung am 26.11.2021

Übungsblatt 5

1) 1-D Teilchen im Potentialkasten

Die Energien der Molekülorbitale linearer Polyene können in erster Näherung mit Hilfe des Modells des eindimensionalen Potentialkastens vorhergesagt werden. Die Abbildung zeigt den Farbstoff β -Carotin:



Berechnen Sie die Wellenlänge des HOMO-LUMO-Übergangs von β -Carotin. Die mittlere Bindungslänge sei 140 pm.

1) 1-D Teilchen im Potentialkasten - Übergangsdipolmoment

Das höchste Energieniveau (HOMO) für ein Teilchen in einer Potentialbox mit einer bestimmten Länge ist 5 ($n = 5$). Durch Auswertung des Erwartungswertes für den Übergangsdipolmoment-Operator ist zu prüfen, ob der Übergang vom Niveau $n = 5$ zum Niveau $n = 8$ (d.h. LUMO+2) erlaubt ist.

Hint: Die normalisierte Wellenfunktion eines 1-D-Teilchens in einem Kasten ist:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

2) Symmetrie von Molekülorbitalen

Zeichnen Sie die σ - und π -Molekülorbitale von Ethen und untersuchen Sie ihre Symmetrie in Bezug auf die Parität unter den folgenden Symmetrieeoperationen:

- Spiegelung in der Ebene, die die beiden Kohlenstoffatome einschließt
- Inversion in der Mitte des Moleküls.