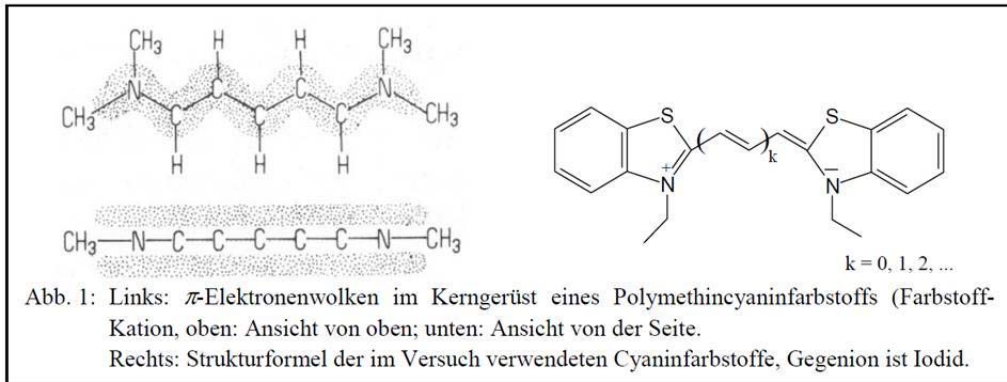
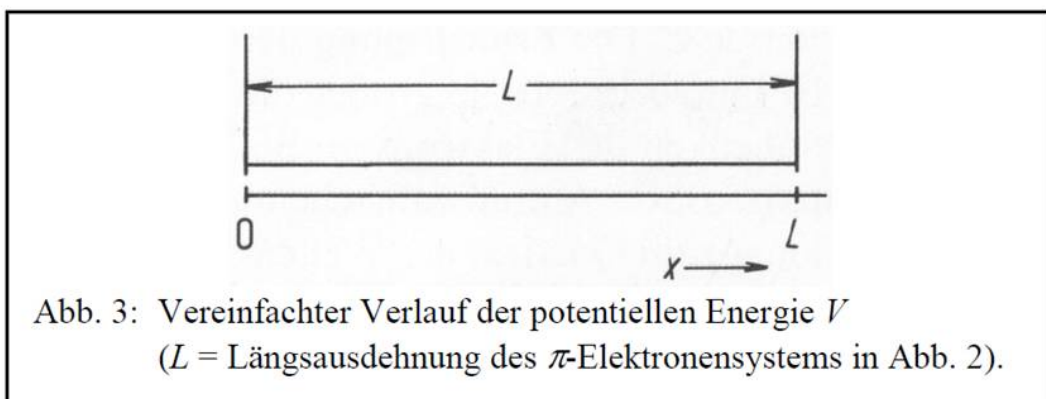
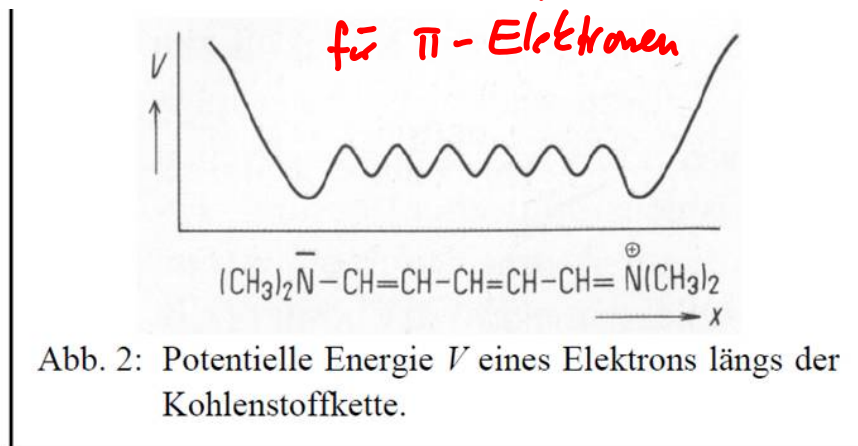


Anregung im 1D-Potentialkasten



Delokalisierte π -Elektronen bewegen sich frei entlang der C-C Kette

Realistisches Potential für π -Elektronen

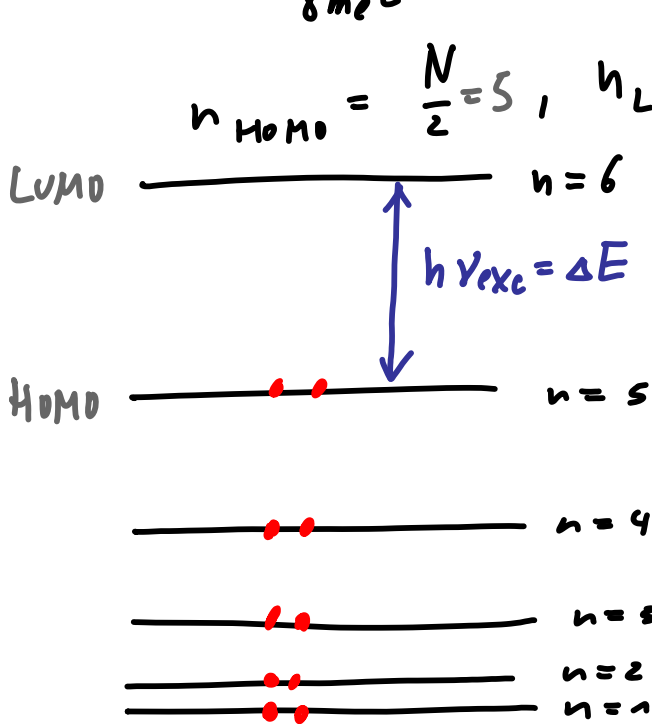


Approximiertes Potential für π -Elektronen



4 konjugierte Doppelbindungen : 8 e⁻
 2 π-Elektronen an N : 2 e⁻ } 10 freie π-Elektronen

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8m_e L^2} \quad n \in \{1, 2, \dots\}$$



$$n_{\text{HOMO}} = \frac{N}{2} = 5, \quad n_{\text{LUMO}} = \frac{N}{2} + 1 = 6$$

$$\Delta E = \frac{h^2}{8m_e L^2} \left\{ \left(\frac{N}{2} + 1 \right)^2 - \left(\frac{N}{2} \right)^2 \right\}$$

$$= \frac{h^2}{8m_e L^2} (N+1)$$

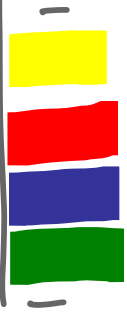
$$L = N \cdot d_0 \quad (d_0 = 140 \text{ pm})$$

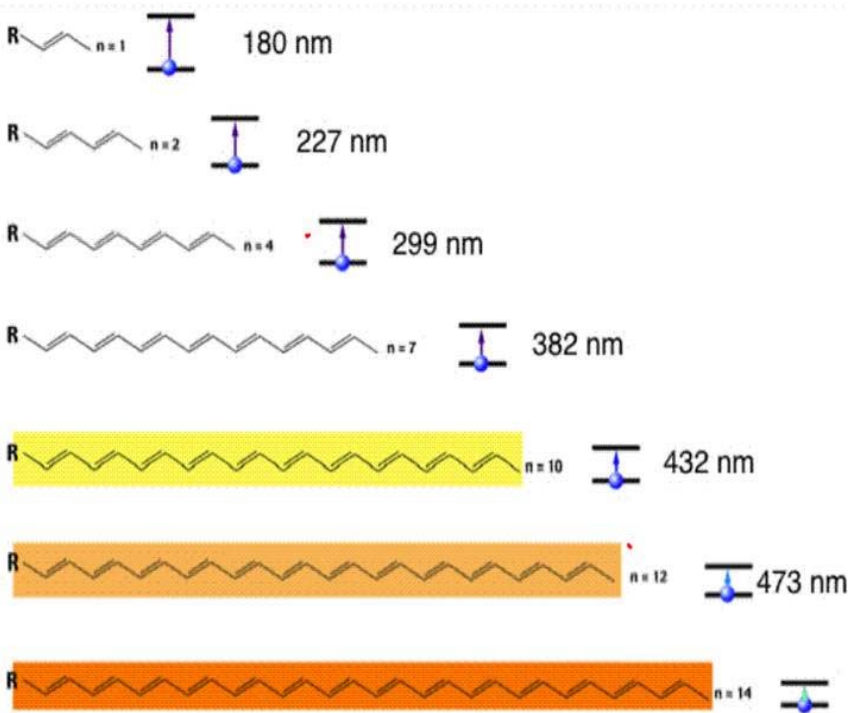
$$\Delta E = \frac{h^2 (N+1)}{8m_e d_0^2 N^2}$$

$$\lambda_{\text{exc}} = \frac{c}{\nu_{\text{exc}}} = \frac{ch}{\Delta E} = \frac{8m_e d_0^2 N^2}{h (N+1)}$$

falls $N \gg 1$: $\lambda_{\text{exc}} \sim N$

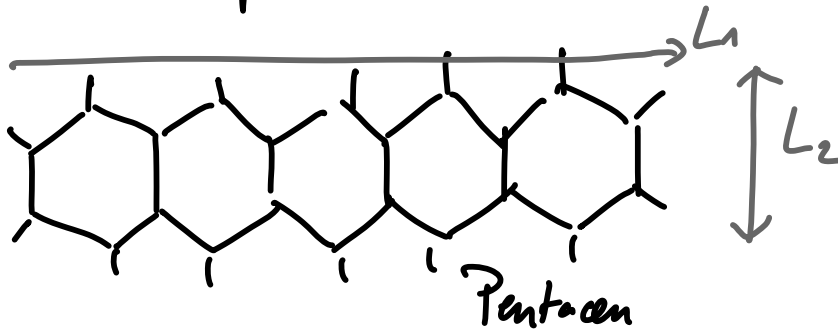
N	$\lambda_{\text{calc}} [\text{nm}]$	$\lambda_{\text{exp}} [\text{nm}]$	Farbe
6	332	373	uv
8	459	416	v
10	587	516	g
12	716	625	o
14	844	735	r
16	973	848	ir



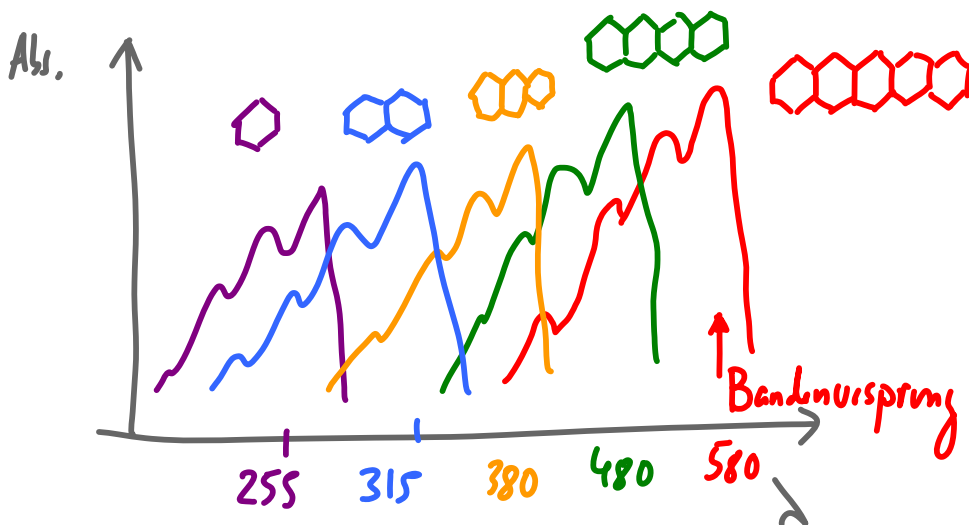


Sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Werten (in Anbetracht der erheblichen Vereinfachung!)
 Farbe der Moleküle wird präzise vorher gesagt!

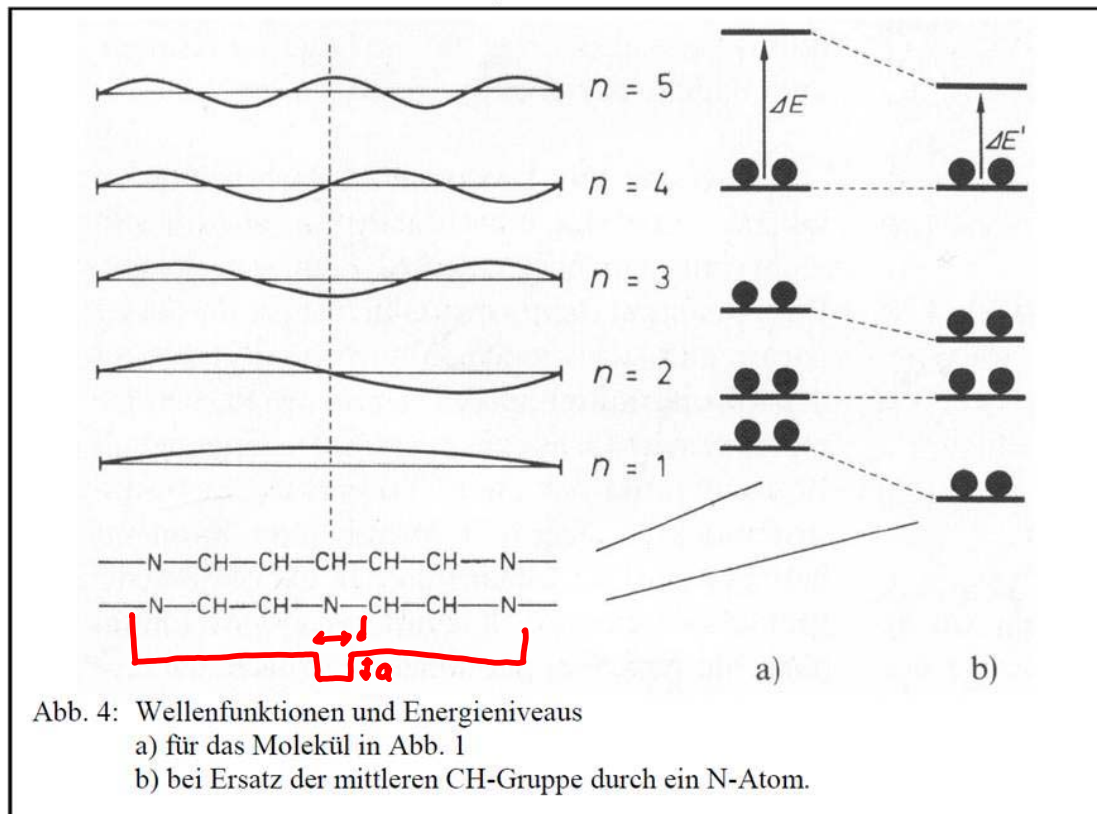
Dasselbe Prinzip kann auch auf Aromaten angewendet werden:



2-dimensionaler Potentialkasten



Durch Einbau von N (anstatt C) kann die Absorptionsfrequenz vergrößert ($N/2$ ungerade) oder verkleinert ($N/2$ gerade) werden



Grund dafür ist eine Absenkung des Potentials an der N-Stelle

Die Wellenfunktionen für n gerade haben an dieser Stelle eine Nullstelle \rightarrow kein Einfluss auf E_n

Die Wellenfunktionen mit ungeradem n haben an dieser Stelle ein Maximum \rightarrow Absenkung der Energie E_n

