Übungsblatt 5: Teilchen im 1D-Kasten und auf 1D-Ring

Aufgabe 1 Teilchen im 1D Kasten:

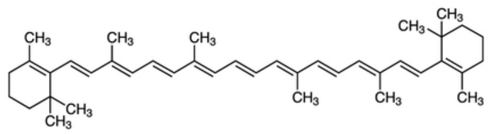

Abbildung 1: β-Carotin

i) Energieübergänge:
Berechnen Sie mit dem Modell des Teilchens im Kasten die Energie eines Photons das einen Übergang zwischen HOMO und LUMO des natürlichen Farbstoffs beta-Carotin induziert. Zählen Sie dafür die Elektronen des π-Systems und bestimmen Sie die Länge des Kastens.

Nehmen Sie um die Länge des Kastens zu bestimmen an, dass alle Bindungen im konjugierten π-System gleich lang sind, mit einer Bindungslänge von 140 pm. Nehmen Sie außerdem einen Bindungswinkel von 120 ° an.

Welche Wellenlänge hat das absorbierte Photon?

ii) Kastenlänge:
Experimentell ist der HOMO-LUMO Übergang im Absorptionsspektrum des β-Carotin Moleküls bei ca 495 nm zu messen. Berechnen Sie die Effektive Kastenlänge mit dem Modell des Eindimensionalen Kasten und der gegebenen Energie. Geben Sie mögliche Gründe für den Unterschied zwischen der experimentellen Energie und der in Aufgabe 1 i) bestimmten.

iii) Erlaubte Übergänge:
In Abbildung 2 sind die Wellenfunktionen des Teilchens im Kasten für n=1,2,3 sowie die Funktion x gezeigt. Bestimmen Sie mit Hilfe der in der Vorlesung besprochenen Symmetrie Überlegung bezüglich zur 0 symmetrischen und antisymmetrischen Funktionen ob folgende Übergänge erlaubt sind oder nicht. Stellen Sie dafür die Formel für den Erwartungswert des Übergangsdipolmoments auf und überlegen Sie ob das Integral ungleich 0 ist.
1: Übergang $\Psi_1 \rightarrow \Psi_2$
2: Übergang $\Psi_1 \rightarrow \Psi_3$
3: Übergang $\Psi_{11} \rightarrow \Psi_{12}$

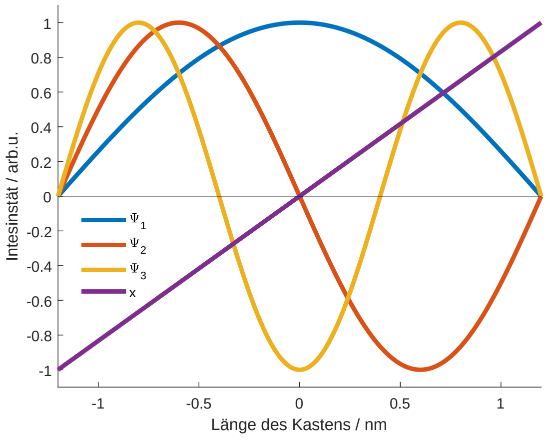

Abbildung 2: WellenFunktion 1-3 und funktion x

Aufgabe 2 Teilchen auf 1D Ring:

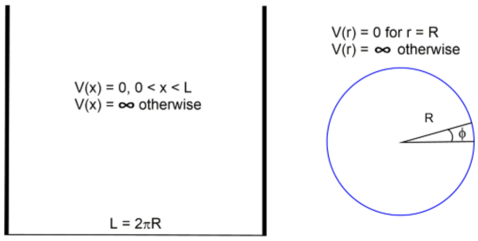

Abbildung 3: Vergleich Teilchen im Kasten und Teilchen auf einem Ring

In der Vorlesung haben wir das Teilchen im Kasten kennen gelernt. Wenn man annimmt, dass Teilchen befinde sich stattdessen auf einem Ring mit einem Kreisumfang L und einem Radius $R = \frac{L}{2\pi}$ so erhält man folgenden Hamiltonian.

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) = \frac{-\hbar^2}{2m \cdot R^2}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \tag{1}$$

Die rechte Seite des Hamiltonians entspricht hier dem Übergang zu Polarkoordinaten mit $x = R \cdot \cos\phi$ und $y = R \cdot \sin\phi$. Mit diesem Haliltonian, dem Potential $V(r) = 0 \ mit \ r = R$; $V(r) = \infty \ mit \ r \neq R$ und der Bedingung dass die Wellenfunktion $\Psi(\phi) = \Psi(\phi + 2\phi)$ seien muss lassen sich folgende Wellenfunktionen aufstellen.

$$\Psi_n(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{in\phi} \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{2}$$

i) Eigenenergie:
Bestimmen Sie die Eigenenergieen des Teilchens auf dem Ring.

ii) Vergleich mit Teilchen im Kasten:
Vergeleichen Sie die Eigenenergieen mit denen des Teilchens im Kasten können Sie die Aromatische Stabilisierungsenergie und die Hückel-Regel daran erklären?