Übungen zur Vorlesung Struktur der Materie – Spektroskopie-Teil

Aufgabe 18:

- a) Riboflavin (Vitamin B2) besitzt eine Absorptionsbande mit Maximum bei 450 nm und einem Extinktionskoeffizienten von E = 12400 l mol⁻¹ cm⁻¹. Eine Küvette von 1 cm Länge mit einer Lösung dieser Substanz in Wasser lässt bei 450 nm 72 % des Lichtes durch. Wie groß ist die Konzentration?
- b) Riboflavin soll als Photokatalysator eingesetzt werden. Dazu wird einer 100 mM Lösung des Substrates (ein Benzylalkohol) soviel Riboflavin zugesetzt, dass das Molverhältnis 100:1 beträgt. Berechnen Sie die mittlere Eindringtiefe des Lichtes bei 450 nm in diese Lösung. Kommentieren Sie das Ergebnis!
- c) Eine 4.3×10^{-5} molare Lösung einer Substanz zeigt bei 370 nm in einer 1 cm Küvette eine Absorptionsbande mit einer Extinktion von E = 0.87. Kann es sich dabei um einen $n\pi^*$ -Übergang handeln? Begründen Sie Ihre Entscheidung.
- d) Was besagt die Regel von Kasha über die Zustände, aus denen man in typischen organischen Verbindungen Fluoreszenz bzw. Phosphoreszenz beobachten kann?
- e) Die Geschwindigkeitskonstanten für die strahlende bzw. nicht-strahlende Relaxation eines Zustandes seien $k_r = 1.2 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ bzw. $k_{nr} = 8.2 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. Handelt es sich bei der Emission um Fluoreszenz oder Phosphoreszenz? Wie groß ist die Abklingzeit der Emission? Welche Quantenausbeute hat die Emission

Aufgabe 19:

- a. Das UV-Spektrum des Hexatriens zeigt eine erste intensive Absorptionsbande mit Maximum bei 258 nm. Welche Kastenlänge würde diese Anregung im Modell des "Teilchens im Kasten" beschreiben?
- b. Wenn Sie diese Kastenlänge zu gleichen Teilen auf die 6 Kohlenstoff-Atome aufteilen, welchen Wert erhalten Sie dann für die C-C Bindungslänge?
- c. Wo sollte das Absorptionsmaximum für β -Carotin liegen, wenn Sie den selben Wert für das Kasteninkrement pro C-Atom nehmen?

d. Tatsächlich liegt das Absorptionsmaximum bei 450 nm. Wie erklären Sie den Unterschied?