

## Stundenprotokoll vom Montag, 26. August 2002

Es fehlen: keine

Zettel: „Jablonski-Diagramm“

### HOMO/LUMO-Elektronensprünge

$S_0 = \text{HOMO} = \text{Highest Occupied Molecular Orbital}$   
Höchstes besetztes Molekülorbital

$S_1 = \text{LUMO} = \text{Lowest Unoccupied Molecular Orbital}$   
Niedrigstes unbesetztes Molekülorbital

Bei Lichteinstrahlung wird ein Elektron von  $S_0$  nach  $S_1$  angehoben. Ohne Lichteinfluss befindet es sich im  $S_0$ -Zustand (HOMO). Wenn sich die Energiedifferenz zwischen  $S_0$  und  $S_1$  im sichtbaren Licht befindet, dann sehen wir die Komplementärfarbe. Zum Beispiel beträgt die Energiedifferenz zwischen  $S_0$  und  $S_1$  die Energie des blauen Lichtes, so sehen wir dann Gelb, weil das blaue Licht absorbiert wird.

Pfeil von  $S_0$  nach  $S_1$ :

- 1.) Absorption von Energie führt zu Anregung eines Elektrons aus dem HOMO- in den LUMO-Zustand.

Pfeil von  $S_1$  nach  $S_0$ :

- 2.) Das Elektron fällt in den Grundzustand zurück und Energie wird wieder freigesetzt. (Elektromagnetisch, Wärme, chemisch)

### Beispiel: Ein schwarzer Gegenstand wird warm

Das geschieht dadurch, dass Licht einstrahlt und die Energie in Wärmeenergie umgesetzt wird, d.h. stärkere Schwingung der Teilchen. Dabei finden drei Absorptionen für die drei Grundfarben statt. Entweder werden alle Farben in einem oder in mehreren Stoffen absorbiert.

Absorption heißt, dass unter Aufnahme der Lichtenergie ein Elektron vom HOMO- in den LUMO-Zustand befördert wird. Um die drei Grundfarben zu absorbieren, sind drei unterschiedlich große Sprünge nötig. Die Farbe blau mit einer kurzen Wellenlänge hat eine hohe Energie. Der Abstand zwischen HOMO und LUMO muss dafür groß sein, damit genau dieses Licht absorbiert wird. Ist der Abstand zwischen den beiden Zuständen klein, so wird weniger Energie für den Elektronensprung gebraucht. So wird z.B. das langwellige, rote Licht absorbiert.

Diese Absorptionen können in einem Stoff erfolgen, d.h. Elektronen springen nicht nur vom HOMO- in den LUMO-Zustand, sondern auch auf höhere nicht besetzte Orbitale. Denkbar ist auch, dass ein schon angeregtes Elektron durch eine weitere Anregung noch weiter vom Kern entfernt wird, oder Elektronen von tieferliegenden besetzten Orbitale (Molekülorbital oder nicht bindende Elektronen) angeregt werden. Auf dem Zettel ist der  $S_n$ -Zustand eingezeichnet. So kann ein Elektron von  $S_0$  nach  $S_1$  und dann gleich auf  $S_2$  springen und von dort aus noch höher auf  $S_3$ . Wenn die einzelnen Zustände unterschiedlich weit auseinander liegen, werden auch verschiedene Wellenlängen absorbiert.

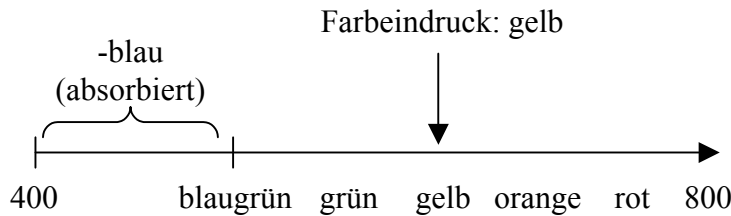
Bei Absorptionen in mehreren Stoffen wird in dem ersten z.B. das ganze blaue Licht absorbiert, in dem nächsten das gelbe und in einem weiteren das rote. Auch so sehen wir nur noch schwarz, d.h. alle Farben fehlen.

## Farbmischungen

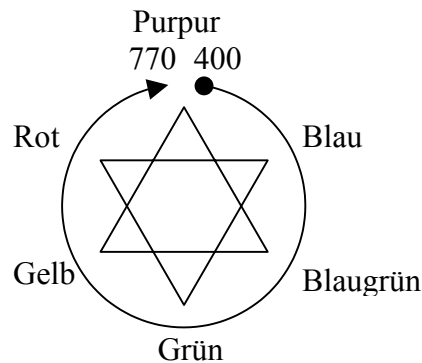
### a.) *subtraktive Farbmischung*

z.B. Gelb = Weiß – Blau

Weißes Licht strahlt auf einen Filter, welcher das blaue Licht absorbiert. Wir sehen die Farbe Gelb.



Hier wird das blaue Licht herausgefiltert, alle anderen Farben bleiben erhalten. Wir erhalten jedoch einen gelben Farbeindruck, obwohl grünes, oranges und auch rotes Licht vorhanden sind.



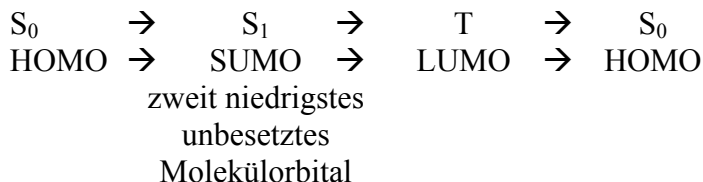
Purpur erhält man wenn man vom weißen Licht die Farbe grün absorbiert oder wenn man blau und rot mischt.

### b.) *additive Farbmischung*

z.B. Gelb = Rot + Grün

In dieser Art der Farbmischung erhalten wir reine Farbe, d.h. man verwendet z.B. Laserlicht, welches eine ganz bestimmte Wellenlänge aussendet. Wenn man nun das Licht eines roten Lasers und das Licht eines grünen Lasers mischt, dann sehen wir die Farbe gelb. Diese Technik wird vor allem im Fernseher verwendet. Dort befinden sich Lichtpunkte für die drei Grundfarben rot, grün und blau. Mischt man diese drei Farben, erhält man alle anderen Farben.

## Die Bedeutung von T



Blau oder UV wird absorbiert, weil viel Energie notwendig ist. Das Elektron springt nicht in den LUMO (T), sondern in den SUMO. Dann fällt das Elektron in den LUMO ( $S_1$ ). Dabei wird kein sichtbares Licht frei, sondern Wärme (IR). Die Energiedifferenz zwischen  $S_1$  und T ist zu gering, als dass diese Energie für ein sichtbares rotes Licht ausreicht. Danach fällt das Elektron wieder in den HOMO zurück und sendet dabei Licht aus. Dieses Licht ist

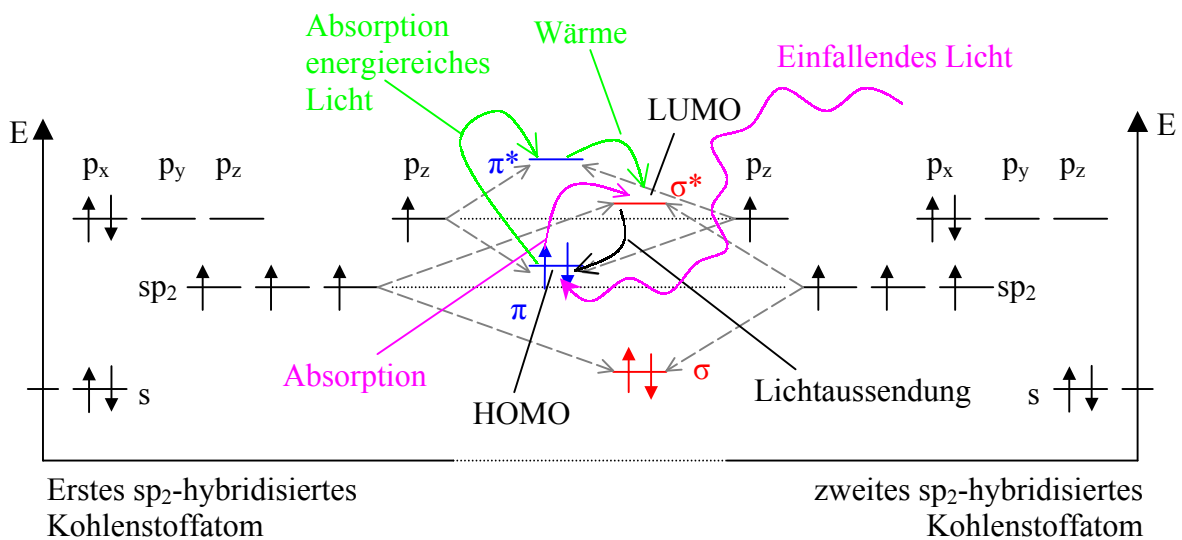
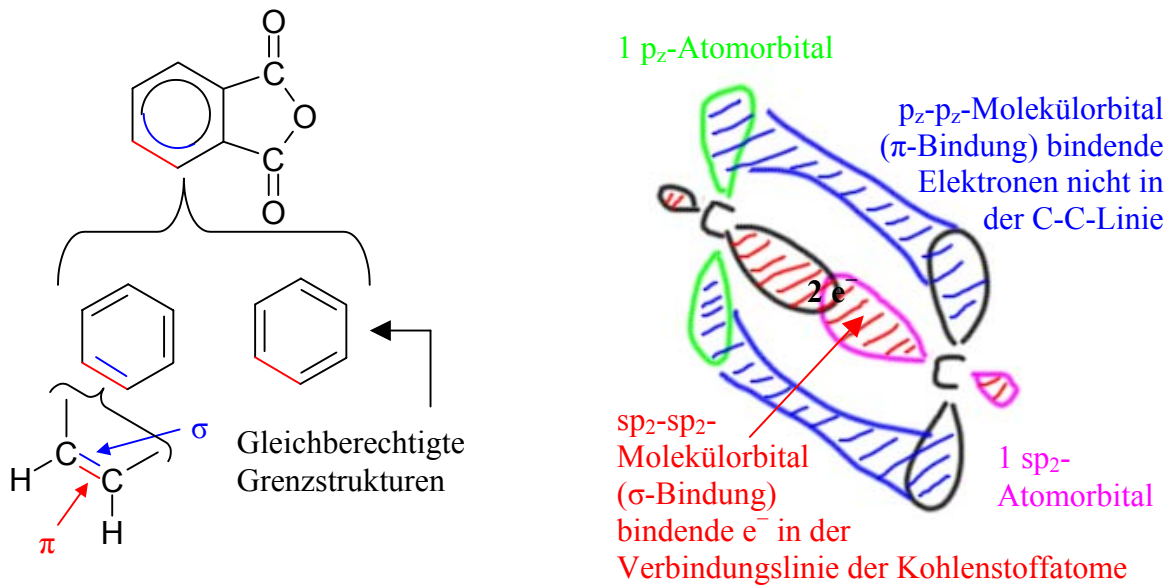
langwelliger (=weniger Energie) als das blaue Licht, da geringer Teil beim Fallen nach T verbraucht wurde. Je nach dem, wie lange das Elektron in T verweilt, nennt man es:

- a.) *Fluoreszenz* = wenn der Stoff bei Lichteinfall leuchtet
- b.) *Phosphoreszenz* = wenn der Stoff im Dunkeln weiter leuchtet

Bei der Phosphoreszenz verweilt das Elektron relativ lange in T, so dass im Dunkeln die Elektronen von T nach S<sub>0</sub> fallen und Licht aussenden.

Allgemein kann man sagen, dass bei der Benutzung von T das ausgesendete Licht immer langwelliger ist, als das absorbierte Licht.

**sp<sub>2</sub>-sp<sub>2</sub>-Bindung zwischen zwei Kohlenstoffatomen**



**Fluoreszenz:**

- π = bindendes p<sub>z</sub>-p<sub>z</sub>-MO
- π\* = antibindendes p<sub>z</sub>-p<sub>z</sub>-MO
- σ = bindendes sp<sub>2</sub>-sp<sub>2</sub>-MO
- σ\* = antibindendes sp<sub>2</sub>-sp<sub>2</sub>-MO

1. e<sup>-</sup> springt von π zu π\* (Absorption von kurzwelligem Licht)
2. e<sup>-</sup> fällt ohne sichtbares Licht auszusenden auf σ\* (Wärme)
3. e<sup>-</sup> fällt von σ\* auf π und sendet langwelligeres Licht aus: Fluoreszenz!

Die  $p_z$ -Orbitale liegen im Energie-Diagramm höher und somit auch die  $\pi$ -Bindung. Die  $\sigma$ -Bindung liegt energetisch tiefer, weil auch die  $sp_2$ -Atomorbitale niedriger liegen.

Die Energieabsenkung bei einem Molekülorbital in der Verbindungsachse ist größer. Das heißt, dass die Energiedifferenz zwischen  $sp_2$ -Atomorbital und  $\sigma$ -Molekülorbital größer ist als zwischen dem  $p_z$ -Atomorbital und dem  $\pi$ -Molekülorbital.

*HA: Im Buch über Auxochrome informieren.*