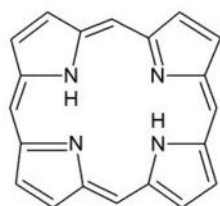


Übungen zur Vorlesung Einführung in die Quantenchemie

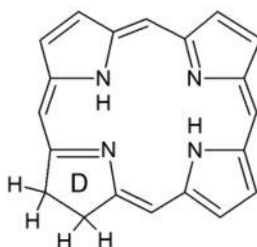
Bearbeitung der Aufgaben bis: Freitag, 6.2.2009

1. Porphyrine

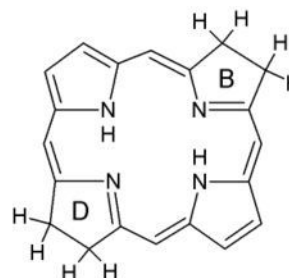
Analysieren Sie die optischen Anregungen von **Porphin**, **Chlorin** und **Bacteriochlorin**



Porphin ($C_{20}H_{14}N_4$)



Chlorin



Bacteriochlorin

sowie **Mg-Porphin**, **Mg-Chlorin**, **Mg-Bacteriochlorin** und ein Modell-**Chlorophyll** ohne Seitenketten bzw -gruppen anhand von ZINDO Rechnungen. Die Eingabedateien dafür finden Sie auf der Webseite <http://www.tu-ilmenau.de/fakmn/beenkenqc.html> zum herunterladen.

- Betrachten Sie nach Abschluss der ZINDO Rechnung im .log-file mittels des MO-Editors das Termschema von HOMO-5 bis LUMO+5 an. Wo treten Entartungen auf? Notieren Sie sich die Energie, Nummer und Buchstaben-Zahlenkombinationen. Letztere gibt die Symmetrie des MO an.
- Generieren Sie nun im MO-Generator Isoflächen für HOMO-1, HOMO, LUMO, LUMO+1. Vergleichen Sie die Bilder (als Image speichern!) mit den Ergebnissen der vereinfachten Hückelrechnung aus der Vorlesung. Wie liegen die Übergangsdipole der möglichen Konfigurationen?
- Betrachten Sie nun im .log-file unter dem Menüpunkt "Results|UV-VIS Spektren" die Absorptionsspektren der Moleküle (rechte Maustaste drücken und "Properties" auswählen. Dann die Einheit eV für X-Axis wählen, und die Verbreiterung etwas reduzieren damit die Banden deutlicher werden. Danach rechte Maustaste und "Save Image" oder Daten exportieren und in Origin bzw. Matlab weiter bearbeiten).
- Suchen Sie im .log-file die Übergangsdipolmomente, und notieren Sie deren X,Y und Z Koordinaten. Überlegen Sie wie die Übergangsdipole jeweils im Molekül liegen. Welchen Einfluß hat hier der fünfte (äußere) Ring im Modell-Chlorophyll?
- Suchen Sie im .log-file nach "Excited State" ("Results|View File", "Results|Stream Output") . Notieren Sie Symmetrie, Energie und Oszillatorstärke. Sowie die Beiträge der einzelnen Konfigurationen ("xxx -> yyy") zum Übergang, die Sie unmittelbar darunter finden. Vergleichen Sie diese mit dem Termschema aus Teilaufgabe a und der auf der Hückelmethode basierenden CI-Rechnung aus der Vorlesung.
- Welche Rolle spielt die unterschiedliche Symmetrie der Moleküle?