

Dipolmomente einiger Phthalimid-Derivate im ersten angeregten Singulettzustand

Von L. BIŁOT und A. KAWSKI

Physikalisches Institut der Pädagogischen Hochschule,
Gdańsk, Polen *

(Z. Naturforschg. **18 a**, 256 [1963]; eingegangen am 28. Dezember 1962)

Auf Grund der früher von uns^{1,2} entwickelten Theorie über den Einfluß des Lösungsmittels auf die Elektronenspektren der Moleküle werden in dieser Arbeit die Dipolmomente im ersten angeregten Singulettzustand sowie die Winkel zwischen den Dipolmomenten im Grund- und Anregungszustand für die folgenden Phthalimid-Derivate:

3-Dimethylamino-6-aminophthalimid (I)

3,6-Diaminophthalimid (II)

3-Aminophthalimid (III)

3-Acetylamino-phthalimid (IV)

bestimmt.

Der Vergleich der erhaltenen Gleichungen^{2,3} mit den Versuchsdaten erlaubt die Bestimmung der unabhängigen Parameter m_1 und m_2 , die in folgender Weise mit den geometrischen und elektrischen Eigenschaften der gelösten Moleküle verbunden sind

$$m_1 = \frac{2(M_e - M_g)^2}{h c a^3}, \quad (1)$$

$$m_2 = \frac{2(M_e^2 - M_g^2)}{h c a^3}, \quad (2)$$

wobei M_g und M_e die elektrischen Moleküldipolmomente im Grund- und Anregungszustand, a den ON-SAGER-Molekülradius, h die PLANCKSche Konstante und c die Vakuumlichtgeschwindigkeit bedeuten.

Für das Dipolmoment im ersten angeregten Singulettzustand M_e und den Winkel φ zwischen den Dipolmomenten im Grund- und Anregungszustand erhalten wir auf Grund von (2) und (1)

$$M_e = \sqrt{M_g^2 + \frac{1}{2} m_2 h c a^3}, \quad (3)$$

$$\cos \varphi = \frac{1}{2 M_e M_g} \left[(M_e^2 + M_g^2) - \frac{m_1}{m_2} (M_e^2 - M_g^2) \right]. \quad (4)$$

Wenn die Dipolmomente im Grund- und Anregungszustand einen Winkel $\varphi = 0$ oder 180° bilden, dann erhält man aus (1) und (2)

$$M_g = \frac{1}{2} (m_2 - m_1) \sqrt{\frac{1}{2} h c a^3 / m_1}, \quad (5)$$

$$M_e = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) \sqrt{\frac{1}{2} h c a^3 / m_1}. \quad (6)$$

Wenn der ON-SAGER-Radius a und die Polarisierbarkeit α des gelösten Moleküls bekannt sind, können aus den Neigungen m_1 und m_2 der Geraden gleichzeitig die Dipolmomente im Grund- und Anregungszustand bestimmt werden. Da die Polarisierbarkeiten der Verbindungen (I) bis (IV) bekannt sind⁴, konnten aus den Neigungen der Geraden die m_1 - und m_2 -Werte für diese Phthalimid-Derivate genau bestimmt werden³. In Tab. 1 sind die α/a^3 , m_1 - und m_2 -Werte zusammengestellt.

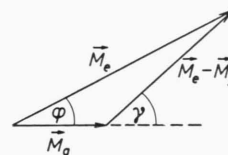


Abb. 1.

Die Dipolmomente im Grundzustand für die oben erwähnten Phthalimid-Derivate (I) bis (IV) wurden kürzlich von BACHSCHIEW⁵ berechnet. Die auf Grund der Beziehungen (3) und (4) erhaltenen Ergebnisse sind in Tab. 1 wiedergegeben (siehe Abb. 1). Man sieht, daß für 3,6-Diaminophthalimid (II) der Winkel φ gleich Null ist. In diesem Fall kann man aus den Gln. (5) und (6) gleichzeitig die Dipolmomente im Grund- und Anregungszustand bestimmen. Das erhaltene Dipolmoment im Grundzustand ist in guter Übereinstimmung mit dem von BACHSCHIEW⁵ berechneten.

Substanz	a Å	$\frac{\alpha}{a^3}$	m_1	m_2	M_g berech.	M_e Gl. (3)	φ	γ	$ M_e - M_g $	M_g Gl. (5)
			in cm^{-1}		in Debye		Gl. (4)			
I	4,5	0,48	1165	2060	2,14	4,8	33°	54°	3,2	—
II	5	0,55	890	2010	2,14	5,4	0°	0°	3,3	2,1
III	3,8	0,62	1130	2950	2,6	4,9	19°	40°	2,5	—
IV	5	0,45	2100	1150	2,4	4,5	90°	118°	5,1	—

Tab. 1.

* Katedra Fizyki, Wyższa Szkoła Pedagogiczna, Gdańsk.

¹ L. BIŁOT u. A. KAWSKI, Acta Phys. Polon. **22**, 289 [1962].

² L. BIŁOT u. A. KAWSKI, Z. Naturforschg. **17 a**, 621 [1962].

³ L. BIŁOT u. A. KAWSKI, Z. Naturforschg. **18 a**, 10 [1963].

⁴ N. G. BACHSCHIEW, Opt. i Spekr. **6**, 646 [1958].

⁵ N. G. BACHSCHIEW, Opt. i Spekr. **13**, 192 [1962].