

Studieretningsprojekt 2023-24

Elevnavn: Aryan Mollasoltani		Klasse: 3a	
Studieretning: MA-FY		Matematik A, Fysik A, Kemi B	
Fag 1: Fysik	Niveau: A	Lærerunderskrift: Martin Werge Willumsen	Initialer: MW
Fag 2: Matematik	Niveau: A	Lærerunderskrift: Ivar Ørn Johannesson	Initialer: IJ

Opgaveformulering:

I hvilken grad kan den uendelige potentialbrønd forudsige et molekyles absorptionsspektrum?

Giv en kort introduktion til den tidsuafhængige endimensionelle Schrödingerligning.

Redegør for den uendelige potentialbrønd og dens løsninger. Fortolk løsningerne fysisk.

Udvælg et farvet stof, hvori du mener at kunne modellere elektronernes energiniveauer ved hjælp af den uendelige potentialbrønd. Forudsig stoffets absorptionsspektrum teoretisk.

Redegør for en selvvalgt numerisk metode der kan anvendes til at løse schrödingerligningen.

Indfør ændringer i potentialet, der har til formål bedre at beskrive dit valgte stof. Løs nu Schrödingerligningen med din valgte numeriske metode.

Design, udfør og analysér resultaterne fra et forsøg hvori du måler et farvet stofs absorptionsspektrum.

Vurdér i hvor høj grad dine teoretiske modeller beskriver dine eksperimentelle resultater.

**Opgavens omfang forventes at være 15 – 20 sider.
Opgaven skal besvares ved inddragelse af begge fag.**

Besvarelsen afleveres på netproever.dk d 12. april 2024 kl. 15:00

Dato

Navn

Opgavens Omfang på ca. 46000 tegn, Afleverede 41 sider

12-04-2024

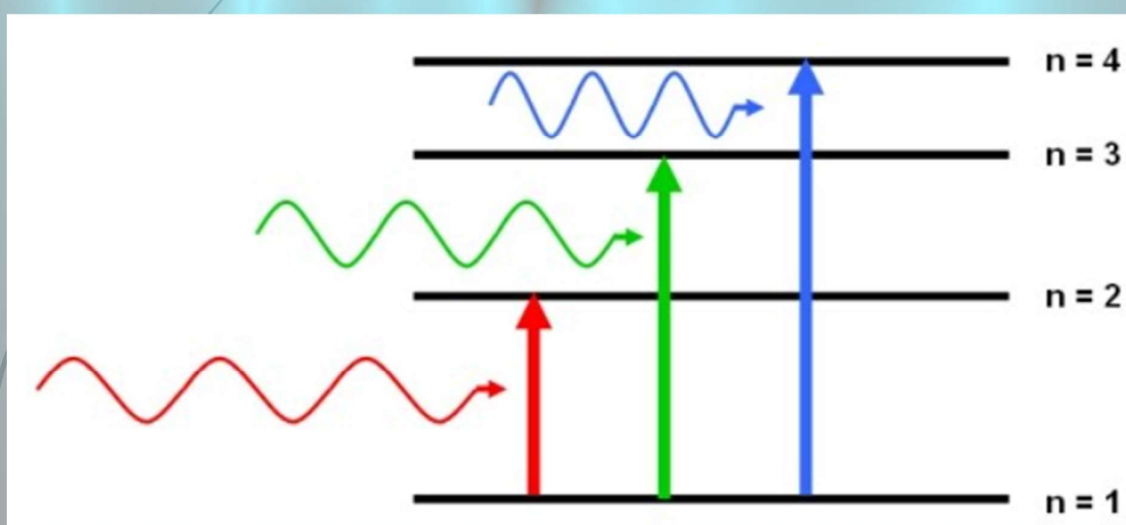
Modellering af molekylers absorptionsspektrum

Lavet af Aryan Mollasoltani

Studieretningsprojekt i Matematik A og Fysik A

Vejledere:

- Martin Werge Willumsen
- Ivar Ørn Johannesson



Resumé

Opgaven undersøger om den uendelige potentialbrønd kunne bruges i praktiske sammenhænge til at forklare absorptionsspektrummet for molekyler. I opgaven blev der arbejdet med farvestoffet Beta-Caroten med den målte absorptionsmaksimum på 458 nm , og den uendelige potentialbrønd uden potential gav en approksimation på 1090 nm . Hermed havde opgaven så en særlig fokus på modellering af delokaliserede elektroner ind i molekylet ved simulering af den endimensionelle tiduafhængige schrödingerligning givet en vilkårlig potentiale $V(x)$. Der blev afprøvet adskillige potentialer, og den mest logiske blev i opgaven fundet til at være givet som

$$V(x) = 2,2 \cdot \cos\left(\frac{22\pi x}{L}\right) + 2,2$$

Hvor L var længden af elektronskyen, hvor elektronen befandt sig i, som blev defineret til at være ca. $2,74 \text{ nm}$. Modellen gav en forudsigelse på absorptionsmaksimum på 458 nm . Det viste sig dog der var mange forskellige potentialer der gav rette værdier af λ_{maks} så modellerne var ikke helt konklusivt ift. elektronen sandsynlighedsfordeling i brønden, men gav rette forudsigelse, som passede med Beta-Caroten målte absorptionsmaksimum.

Indholdsfortegnelse

1.	Indledning - Hvordan beskrives lys på atomært plan?.....	4
2.	Metodeafsnit.....	4
3.	Den tidsuafhængige endimensionelle schrödingerligning.....	5
3.1.	Formalisme	5
3.2.	Den uendelige potentialbrønd og dens løsninger.....	7
4.	Formodning.....	14
4.1.	Simulering af den endimensionelle tidsuafhængige Schrödingerligning	19
5.	Forsøg.....	24
6.	Indføring af perturbationer	28
6.1.	Simuleringsresultater.....	30
6.2.	Vurdering af modeller.....	32
7.	Konklusion	33
8.	Litteraturliste.....	34
9.	Bilag	37

1. Indledning - Hvordan beskrives lys på atomært plan?

Menneskeheden har altid forsøgt at beskrive lys og dens farver. Gennem tiden har fysikere fået mere og mere forklarende teorier om lysets sammenspil med stof, som skaber farver vi ser alle steder omkring os og har formet vores opfattelse af verden. Siden grundlæggelsen af det moderne fysik i 20. århundrede, har vi fået en omfattende forståelse af denne sammenspil som sker på det atomære plan. Det har dog vist sig, at atomernes mikrokosmos er mystisk. Det kan ikke beskrives med klassisk fysik og går nogle gange imod menneskets fornuft. Alligevel er dette en vores bedste beskrivelser af verden, og det burde undre os, hvordan vores viden på atomært plan kan praktisk bruges til at forklare ting som vi ser med øjnene? Hvordan kan man bruge denne viden til beskrive fænomener i det makroskopiske skala?

I opgaven forsøges der at beskrive et fænomen som ses med øjnene, nemlig farven af nogle bestemte stoffer vha. moderne fysik, mere specifikt kvantemekanik. Schrödingerligningen løses i tilfælde af en partikel fanget i en uendelig potentialbrønd, og der undersøges nærmere om energiniveauerne i den uendelige potentialbrønd kan give en kvantitativ beskrivelse af farvestoffet absorptionsspektrum. Der ville endvidere arbejdes med at optimere potentialbrønden og forsøge at simulere schrödingerligningen for en vilkårlig potentiale, og modellere energiniveauerne mht. farvestoffet absorptionsspektrum. Til allersidst måles farvestoffets absorptionsspektrum eksperimentel og sammenlignes med teoretiske modeller.

2. Metodeafsnit

Gennem opgaven er der klart blevet brugt den hypotetiske-deduktive metode. Der er en hypotese om nogle farvestoffers absorptionslinjer kan teoretisk modelleres. Dette testes på baggrund af Schrödingerligningen, hvor den fladbundet uendelige potentialbrønd bliver brugt som en model. Heraf måles stoffet virkelige absorptionskurve og den eksperimentelle værdi kommer til at være altafgørende for modellens og dermed hypotesens falsificering. Afhængigt af resultatet vælger vi at forbedre modellen efter og igen kigger om modellen giver mening.

Man opdager, at i denne proces er der benyttet af modellering, hvor vi i starten prøver at modellere med den fladbundet uendelige potentialbrønd som er en meget simplificeret model, også når den ikke helt reflektere virkelighed, så vælger vi at forbedre modellen.

Styrken af metoden i vores opgave er, at det er ret nemt at gentage forsøget, lave simuleringerne så for at komme til de samme resultater igen. Vores resultater er klart *reproducerbart*.

Klart en svækkelse af metoden er vi sammenligner modellerne med virkeligheden før vi kommer frem til den endelige model. Vores modeller er *semi-empirisk* og er ikke fuldstændig lavet fra grundprincipper.

En anden problem som vi kommer til se henne af vejen er falsificerbarheden af vores hypotese. Det er klart man ikke kan se atomer og deres sammensætninger, dermed bliver man nødt til at modellere virkeligheden. Modeller i det atomære plan er jo baseret på nogle matematiske sætninger, men fordi man har fået resultater som er matematiske passende med virkeligheden gennem ens model, betyder det ikke at modellen viser virkeligheden helt korrekt.

3. Den tidsafhængige endimensionelle schrödingerligning

Schrödingerligningen er en af de førende formler fra moderne fysik som var postulerede og introduceret i 1926 af Erwin Schrödinger. Den er simpel at skrive, men yderst svært at forstå. Dette afsnit prøver tager hul på, hvad den viser fysisk, og hvordan det kan bruges til at beskrive nogle bestemte systemer indenfor vores verden. Vi kan få en simpel intuition for schrödingerligningen ved at sammenligne den med en lignende formel fra klassisk mekanik. Som vi ved fra analytisk mekanik så beregnes Hamiltonen H for et system som

$$T + V = H$$

hvor summen af systemets kinetiske energi T og potentielle energi V giver systemets totale energi H . Hamiltonen er gældende for systemer indenfor klassisk mekanik, men ikke gældende for elementarpartikler.

I kvantemekanik arbejder vi med en lignende formel. Vi arbejder med schrödingerligningen. Formen af schrödingerligning afhænger meget af hvilken situation man ville undersøge. Den fulde steds og tidsafhængige schrödingerligning ser lidt anderledes. I vores undersøgelse kommer vi mest til at se den i følgende form som differentialligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

hvor \hbar er den reducerede Plancks konstant, m er massen af partiklen i systemet, og $\psi(x)$ er systemets karakteristiske *bølgefunktion* som matematisk beskriver systemets *tilstand*.¹ Dette fortolkes meget dybere i næste afsnit. Læg mærke til, at $\psi(x)$ er afhængigt kun af x og dermed er ligningen endimensionelt.

Differentialligningen kan kun løses i tilfælde af en givet stedsafhængige potentialenergifunktion $V(x)$. $V(x)$ specificeres afhængig af den situation man ville undersøge, lidt ligesom i Hamiltonmekanik.

I vores undersøgelse bruger vi både en numeriske metode til at beregne differentialligning for forskellige givet $V(x)$, og løser differentialligningen analytisk for $V(x) = 0$ til at beskrive elektroner i nogle specifikke molekyler.

3.1. Formalisme

I kvantemekanik bruger vi vektorrum til at beskrive fysiske systemer, dog er det ikke en almindelige vektorrum. I kvantemekanik bliver der brugt *Hilbert rum*, hvor det fysiske systemet bliver skrevet med vektoren $|\psi\rangle$, der er udspændt af n basisvektorer. Antallet af basisvektorer afhænger af vektorens dimension. I vores tilfælde repræsenterer tilstandsvektoren en funktion som er kontinuert.

¹ Grosman Michelsen, K.. & Thorkild Pedersen, D.. (2020). EN VERDEN AF FYSIK, s. 246

Der er altså tale om en *kontinuerlig variabel* og dermed er tilstandsvektoren uendelig dimensionalt². Notationen $|\cdot\rangle$ hedder *ket-notation* og bruges i vores tilfælde nogle gange til at repræsentere en funktion, men i form af en uendelig dimensional vektor. Man ser undervejs i opgaven, at for at repræsentere "systemet", ψ , skifter vi mellem notationer som $\psi(x)$ og $|\psi\rangle$.

Udover det en hattet bogstav f.eks. \hat{H} så er det tale om en *operator*. Operatorer er en centralt del af kvantemekanikken og dens postulater. En operator i vores sammenhænge er altid en observerbar egenskab af et fysisk system, dog er hver operator også matematisk defineret. F.eks. er Hamiltonoperator \hat{H} defineret som følgende

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (2)$$

hvor \hat{T} er kinetiskenergioperator og \hat{V} er potentialenergioperatoren, og hver operator repræsenterer henholdsvis fysiske egenskaber nemlig kinetisk og potentialenergi.³

Schrödingerligningen kan også skrives i formen

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (3)$$

Ude fra dette kan 1 udledes. Denne form giver os også lov til at se på ligningen som en egenverdiproblem indenfor lineær algebra, da vi ved for ethvert operator \hat{A} er der en række speciale vektorer $|v_n\rangle$ som ikke ændres når operatoren laver en afbildning af vektoren dvs.

$$\hat{A}|v_n\rangle = \lambda_n|v_n\rangle$$

Hvor $|v_n\rangle$ kaldes egenvektoren og λ_n er egenverdierne af \hat{A} .⁴ Dette er matrixligningen også kaldt egenverdiproblem, hvor problemet går ud på at finde tilsvarende egenvektorer og egenverdier givet en \hat{A} . I kvantemekanik finder vi tilstandene $|\psi\rangle$ med den tilsvarende energi E givet \hat{H} , som afhænger af den givet potentiale $V(x)$.

Computeren løser matrixligninger i et hug for egenverdierne med tilsvarende egenvektorer og dermed går vi ikke længere i dybde med løsning af egenverdiproblemet. Schrödingerligningen løses som en egenverdiproblem i simulationsafsnittet for en givet potentiale $V(x)$.

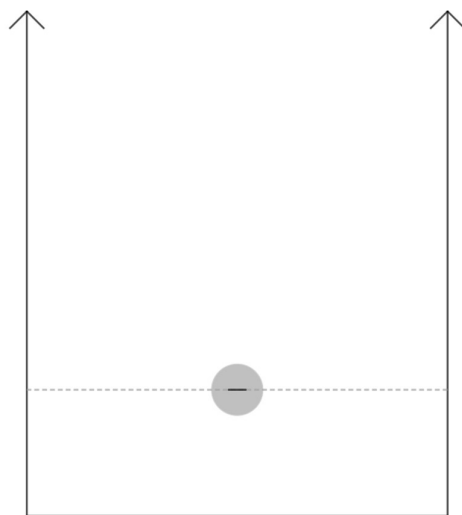
² Hoff, U. B. . (s.d.). Kvantemekanik postulater, notation, polarisationstilstande, entanglement, Bells ulighed s. 1

³ Griffiths, D. J.. (1994). Introduction to Quantum Mechanics, s. 22

⁴ Hoff, U. B. s. 1

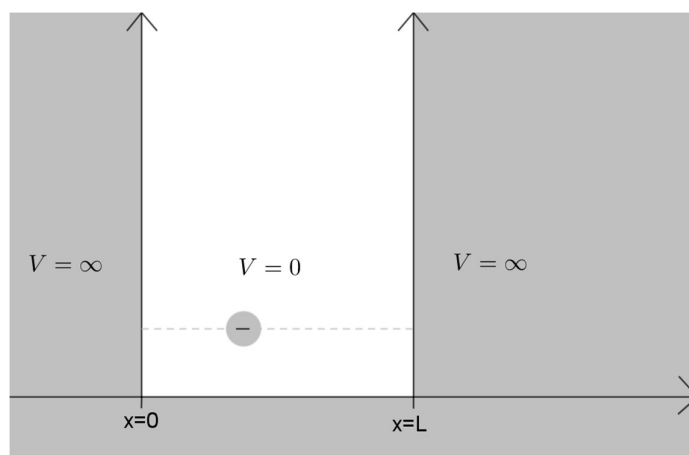
3.2. Den uendelige potentialbrønd og dens løsninger

I denne afsnit ville vi se på en af de mest kendte løsninger af Schrödingerligningen fra 1. afsnit for et meget simpelt kvantesystem som vi ville bruge i vores undersøgelse. Systemet hedder "den uendelige potentialbrønd" eller "partikel i en boks". Systemet tager udgangspunkt i en partikel f.eks. en elektron som bevæger sig frem og tilbage på en ret linje i en afgrænset lukket område.⁵



Figur 1: Elektronen ses i en "boks", forevig fanget, bevægende langs 1 dimension. Den går frem, rammer væggen, kommer tilbage indtil den rammer væggen osv.

Vi vil bruge den endimensionelle tidsuafhængige Schrödingerligning, til at beskrive partiklens "opførsel". Dette er blot en hypotetisk problem. F.eks. ville partikler i virkeligheden aldrig bevæge sig fuldstændigt endimensionelt osv. men systemet er alligevel virkelige nyttigt og præcis til at beskrive fænomener på atomært plan. For at bruge schrödingerligning må man først specificerer partiklens potentialenergi $V(x)$ forskellige steder. Vi kan illustrere systemet vha. følgende figur:



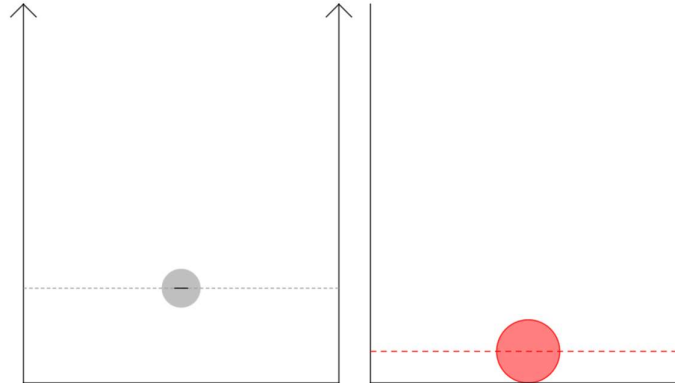
Figur 2: Her ses den uendelig potentialbrønd i en koordinatsystem. Partiklen eksisterer ikke i grå områder. De to lodrette akser viser brøndens vægge.

Den hvide område er selve brønden, hvor partiklen bevæger sig helt frit uden nogle påvirkninger dermed, har partiklen i denne område ingen potentialenergi dvs. $V(x) = 0$. Læg mærke til at

⁵ Grosman Michelsen, K.. & Thorkild Pedersen, D. (2020)

brønden er defineret fra $0 \leq x \leq L$, hvor L er længden af brønden. Uden for boksen kan partiklen slette ikke eksistere, og det betyder at i denne område har partiklen et uendelig stor potential og dermed $V = \infty$, i de grå områder. Vi kan hermed forstå hvorfor denne specifikke løsning til schrödingerligningen hedder den uendelige potentialbrønd. Partiklen er simpelthen fanget i en område som er brønden begrænset af den uendelige potentialbarriere.

En klassisk eksempel som man kan sammenligne dette med er en bold som ruller på en friktionsløs gulv i en kasse under ingen påvirkning af kræfter. Den går frem, rammer siden uden friktion, kommer tilbage igen, rammer den anden side osv. De to systemer ligner hinanden, men principalt fuldstændigt anderledes. Elektronen befinder sig på atomært plan.



Figur 3: side om side visualisering af uendelige potentialbrønd(Venstre) med en bold i en kasse(Højre). Bolden har fysiske vægge, mens elektronen er begrænset af en uendelig potentialbarriere.

Hvis vi går tilbage til problemet, kan vi se, at forskriften for potentiale energi fra figur 2 bliver:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{hvis } 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{ellers} \end{cases}$$

Nu kan vi løse for schrödingerligningen. Vores schrödingerligning(formel 1) beskriver som sagt på en måde at energi er bevaret i et kvantesystem.

Nemlig summen af den kinetiske energi og potentialenergi af partiklen giver os energien af systemet. Udenfor boksen er løsningen meget simpelt og logisk nok er løsningen trivielt, da vi ved at partiklen ikke må eksistere uden for brønden og dermed:

$$\psi(x) = 0$$

Dette passer også med figur 2. Det interessante løsning er inden for brønden altså der, hvor partiklen eksisterer. Vi kan allerede deducere matematisk at $Dm(\psi) = [0; L]$. I denne område ved vi, at $V(x) = 0$ og det medfører at den endimensionelle tidsuafhængige schrödingerligning bliver skrevet som

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Hermed kan vi løse for differentialligningen analytisk.⁶

⁶ Griffiths, D. J.. (1994), s. 26

Først omskriver vi som følgende:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$$

Hvor $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. En lille pointe er, at energien $E > 0$ og ikke kan antage negative værdier.⁷

Det sidste udtryk viser en differentialligning som er identisk med differentialligningen for en klassisk harmonisk oscillator. Her er den fuldstændige løsning

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), 0 \leq x \leq L$$

Konstanterne A og B findes vha. *grænsebetingelser*. Det er nogle fysisk og logiske betingelser bølgefunktionen $\psi(x)$ skal fylde, så bølgefunktionen giver fysisk mening. Vi ved i endepunkterne, når $x = 0$ og $x = L$ er der mur, og her kan partiklen ikke eksistere, og vi ved også at $\psi(x)$ skal være kontinuert i endepunkterne når $x = 0$ og $x = L$. Begge pointer medfører at

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

Vi kan så implementere disse såkaldte *grænsebetingelserne* i vores bølgefunktionen:

$$\psi(0) = 0 \Leftrightarrow A \sin(k0) + B \cos(k0) = 0 \Leftrightarrow B = 0$$

Hermed ved vi at bølgefunktionen har formen

$$\psi(x) = A \sin(kx)$$

Vi kan så se at der også gælder

$$\psi(L) = 0 \Leftrightarrow A \sin(kL) = 0$$

Her kan også A antage værdien 0, men så betyder det at $\psi(x) = 0$ over hele området. Dette er den trivielle løsning (at partiklen ikke eksisterer) så for de unikke løsninger må der gælde at $A \neq 0$. Med det sagt, må der gælde

$$\sin(kL) = 0$$

Matematisk ved vi, at sinusfunktionen antager værdien 0 for $n \cdot \pi$ hvor $n \in \mathbb{N}$, og dermed

$$k_n L = n\pi \Leftrightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}$$

Substitution af $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ i overstående giver så os

$$\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} = \frac{n\pi}{L} \Leftrightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Det har vist sig, at den sidste grænsebetingelse ikke siger noget om konstanten A , men det viser noget om de *energier* som systemet kan antage.

Bølgefunktionen bliver så

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad 0 \leq x \leq L, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

⁷ Griffiths, D. J. (1994), s. 25

Vi mangler til sidst at bestemme A . Dette gøres ved at *normalisere* bølgefunktionen. Normalisering er i sig selv en del af fortolkningen, men lige nu kan vi sige, at partiklen kan kun finde sig i boksen, og dermed burde der matematisk gælde

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad (4)$$

\Updownarrow

$$A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 \Leftrightarrow A^2 [x]_0^L = 2 \Leftrightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

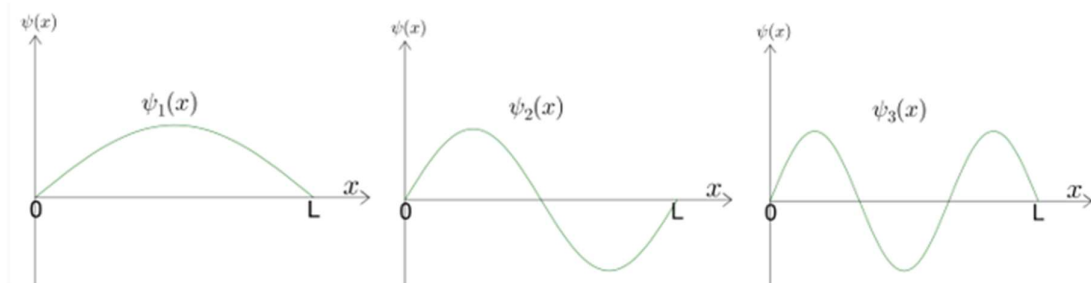
Løsning af integralet lå uden for undersøgelsens formål. Schrödingerligningens løsning for den uendelige potentialbrønd er hermed

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), 0 \leq x \leq L, n = 1, 2, 3 \dots$$

Og energien E_n for en partikel der befinder sig i n 'te tilstand i en endimensionel brønd med længden L er givet som

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (5)$$

Vi kan simpelthen tegne graferne af tilstandene vha. en tegneprogram.



Figur 4: De første 3 bølgefunktioner tegnet

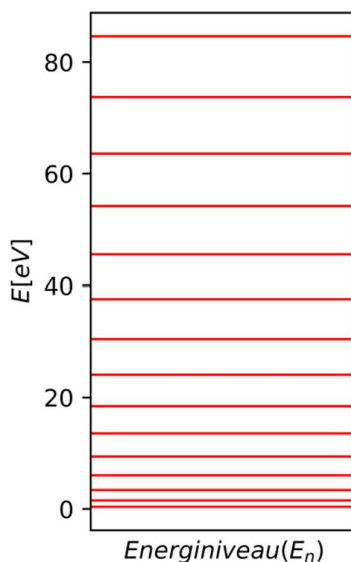
Læseren burde hermed undre sig over hvad vi egentlig ser? Hvad viser bølgefunktionen, og hvor blev partiklen af?

Bølgefunktionen som vi kigger på, er endimensionel, og $\psi(x)$ er i sig selv svært at fortolke, men man kan sige at den giver en samlede beskrivelse af partiklens målbare størrelser som sted, energi, impuls i systemet. Bølgefunktionen viser altså systemets *tilstand*⁸, og dermed kan vises med notationen $|\psi\rangle$. ψ_1 er *grundtilstanden* som også har den laveste energi E_1 , mens de højere tilstande kaldes de *exciteret* tilstande. Fra vores udledning kan vi se, at hver tilstand n , har en specifikt energi E_n . Læg

⁸ Grosman Michelsen, K.. & Thorkild Pedersen, (2020) s. 239

mærke til, at i modsætning af den klassiske opfattelse af energi så kan tilstanden her **kun** antage bestemte værdier dvs. energien er *kvantiseret* og kommer i nogle bestemte mængder.

Vi så jo også, hvordan schrödingerligning kunne skrives som en egenværdiproblem, hvor matricen \hat{H} kunne tage diskrete værdier af E_n i formel 3, og dermed er selve teori også matematisk bygget på kvantisering af energien.



Figur 5: De første 15 energiniveauer sat ind i en graf beregnet i elektronvolt fra formel 6 for en elektron med en brøndlængde på 1 nm

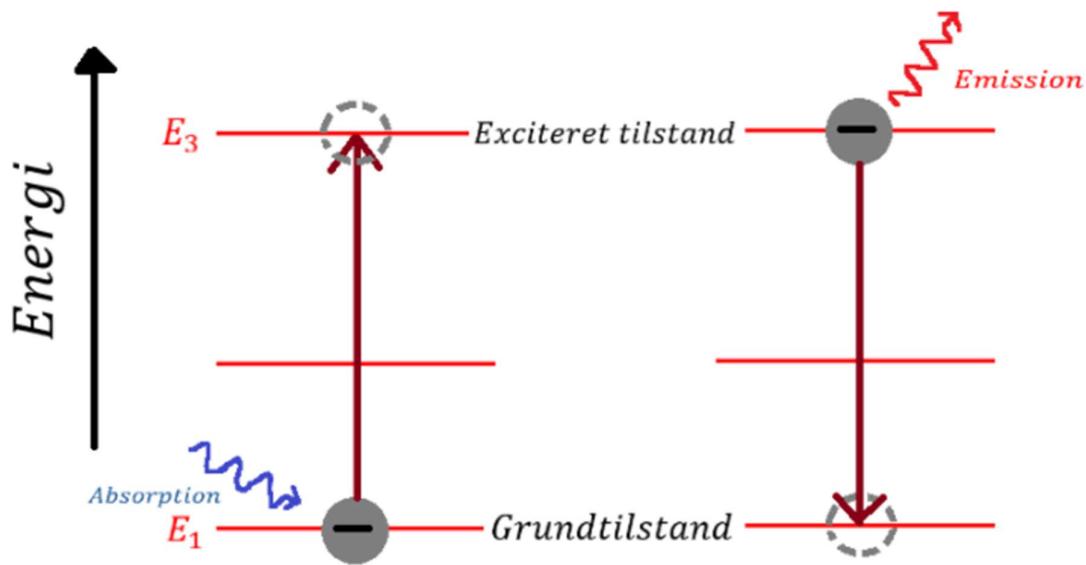
Tanken om kvantisering af energien er lidt i strid mod klassisk mekanik. I klassisk mekanik er energispektrummet *kontinuerligt* og her er det diskret, som er en af de grundlæggende egenskaber af kvantemekanik. Noget andet der er lidt mærkeligt er $E_1 > 0$ fra formel 6. Grundtilstanden har altså en højere energi end 0.

Læg også mærke til energien er uafhængig af tiden, og dermed er partiklen i nogle særlige *stationære energitilstande*. Partiklen kan så overgå fra en energitilstand til den anden enten ved absorption eller Emission af en foton med en energi nøjagtige tilsvarende til differensen mellem 2 energiniveauer ΔE (se figur 6):

$$\Delta E = E_2 - E_1 \quad (6)$$

Bølgelængde af fotonen som bliver udsendt kan beregnes vha. energi-bølgelængde relationen

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} \Leftrightarrow \lambda = \frac{hc}{\Delta E} \quad (7)$$

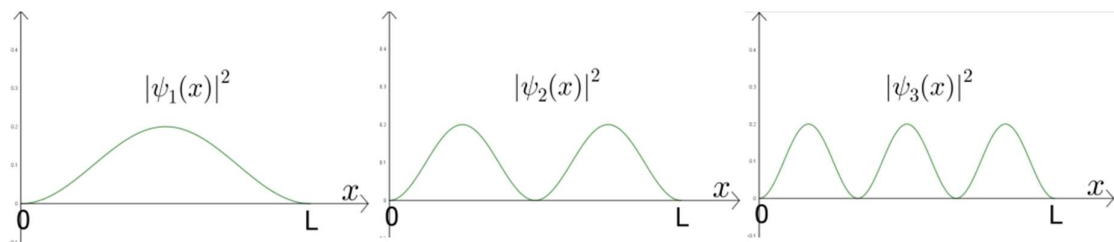


Figur 6: Ved absorption hopper elektronen fra en lavere energiniveau til højere energiniveau også falder elektronen tilbage til ved emission af fotonen med tilsvarende bestemt mængde energi ΔE . Her er det $\Delta E = E_3 - E_1$

Til sidst er det vigtigt at vide bølgefunktionen er faktisk ikke en målbart størrelse. Dette betyder alligevel ikke, at bølgefunktion $\psi(x)$ er ubrugeligt. Bølgefunktionen har en statistisk fortolkning, da $\psi(x)$ kan bruges på en bestemt måde som en sandsynlighedsfordeling til at bestemme sandsynligheden for, hvor partiklen kan befinde sig i et område mellem x_1 og x_2 ind i brønden, som følgende

$$P(x_1 \leq x \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx \quad (8)$$

hvis $\psi(x)$ er en *normaliseret* funktion.⁹ Det giver mening med, hvorfor vi lod integralet i *formel 5* være lige med 1 for at finde normaliseringskonstanten, fordi sandsynlighed for at partiklen findes i hele brønden er 100% og dermed 1.



Figur 7: De første tre tilstands sandsynlighedsfordeling.

Problemet er dog sandsynligheden for at elektronen befinder sig et sted giver os ikke, hvor er den præcist. Vores teori er i denne tilfælde *indeterministisk*. Vi kan vide, hvor partiklen præcis ligger ved at foretage en *måling* på systemet.

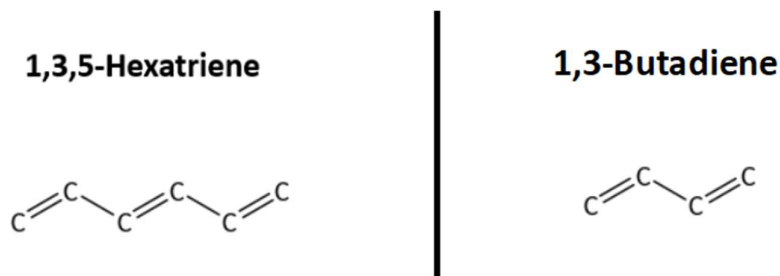
⁹ Grosman Michelsen, K. & Thorkild Pedersen, (2020) s. 241

Vi ved også før målingen er partiklen endda i *superposition* af flere tilstande og dvs. partiklen ses for at være i flere stationære tilstande til et bestemt tid. Når vi så observerer partiklen, lad os sige elektronen, f.eks. med en apparat så følger superpositionens *kollaps*. Kollapset betyder helt konkret, at partiklen mister fuldstændigt bølgeagtige egenskaber, og man observerer at partiklen befinder sig kun på et sted i en bestemt tilstand. Partiklens bølgeagtige egenskaber giver anledning til *partikel/bølgedualiteten*, som går ud på fænomener på atomært niveau kan paradoksalt nok have både bølge- og partikelegenskaber.

Der skal understreges, at en uendelige potentialbrønd er en meget hypotetisk og simpelt model. Man undrer sig over om modellen kan beskrive noget som helst i denne verden, men som vi kommer til at se trods sin enkelhed er den en af de grundelementer i vores moderne forståelse af verden, som også bruges som en værktøj i opgaven.

4. Formodning

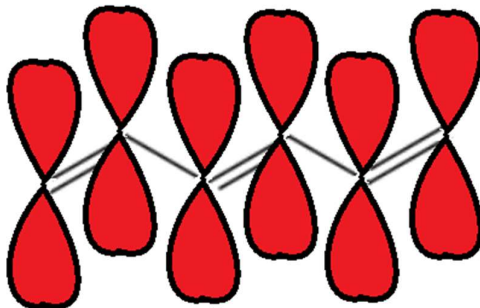
I denne afsnit bruges formlerne fra sidste afsnit til at modellere en elektron i et molekyle. Siden opdagelsen af kvantemekanikformalismen, så har det været muligt at beskrive mange af de systemer på atomært og lidt på molekylært plan vha. kvantemekanik. Kvantemekanik har endda været succesfuld i at forklare formen af atomorbitaler, og hvordan elektroner sidder i dem¹⁰. Der er så en bestemt gruppe af molekyler med *konjugerede dobbeltbindinger* dvs. molekyler som indeholder skiftevis enkelt- og dobbeltbindinger i en række. Et eksempel på disse molekyler ses på nedstående.



Figur 8

Ifølge molekylorbital teori så er dobbeltbindingerne i kemiske molekylers carbonatomer en konsekvens af kombinationen af s , p_x og p_y orbitaler¹¹, der kombineres og danner 3 sp^2 -orbitaler(bilag 1).

Læg mærke til at der så står en urørt p_z orbital for carbonatomet, og p_z orbitalen står så vinkelret på de andre orbitaler. På strukturen ser p_z orbitalerne således ud:



Figur 9: for Hexatriene

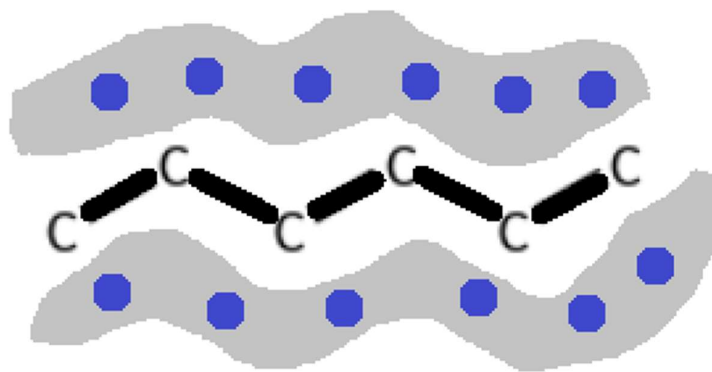
Det viser sig flere p_z -orbitaler ved siden af hinanden(figur 9) overlapper hinanden. Når p_z orbitalernes overlapper dannes der en π -elektron sky¹². Desto flere konjugerede dobbeltbindinger, desto en længere elektron sky.

I molekyler som dette bliver elektronerne i den konjugerede del *delokaliserede*. I det p_z orbitalerne overlapper får elektronerne som er delokaliserede lov til at bevæge sig frit frem og tilbage i hele elektron skyen. Dette minder meget om elektronen som har lov til at frit at bevæge sig frem og tilbage i en potential brønden.

¹⁰ Soderberg, T. . (s.d.). Molecular orbital theory- conjugation and aromaticity. LibreTexts Chemistry.

¹¹ Nielsen, O. V.. & Axelsen, V.. (2011). BASISKEMI A., s. 112-113

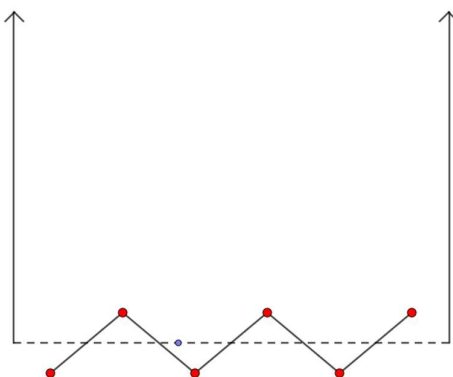
¹² Nielsen, O. V.. & Axelsen, V.. (2011). BASISKEMI A., s. 117-118



Figur 10: grov illustration over delokalisering af elektronerne (de blå prikker) ind i skyen.

Det er nemlig derfor vi har en stærk mistanke om at en elektron ind i et molekyle med konjugerede dobbeltbindinger kan modelleres som en elektron ind i den uendelige potentialbrønd teoretisk. Man modellerer energiniveauerne med formel 6, og bruger dette til at finde tilsvarende bølgelængde lys der exciteres.

Startmodellen som ikke er *pertuberet* ser sådan ud, ligesom en helt almindelig UPB¹³:



Figur 11: UPB, hvor elektronen (blå prik) modelleres ind i molekylet ind mellem kernerne (rød prikker). Der antages at potentialet fra kernerne er 0

Vi starter dog med at antage $V = 0$ i konjugerede dobbeltkæde, og dermed kan vi direkte bruge de analytiske løsninger. Dette er en meget grov antagelse, men som vi kommer til at se tilstrækkelig god til at begynde med.

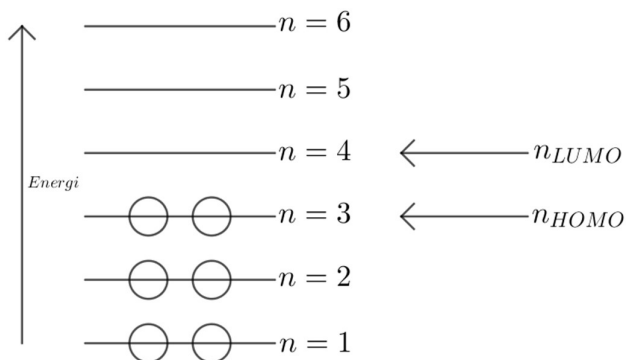
Læg mærke til at i de overlappende p_z -orbitaler er der en 1 delokaliserede elektron for hver kerne i π -elektronskyen (figur 10). Dette passede med, at for molekylet Hexatriene var der 6 delokaliserede elektroner i hele kæden.¹⁴ Vi kigger dog kun på en elektrons bevægelse ind i skyen.

Ifølge kvantemekanik, så har hver orbital sin eget bølgefunktion med sin respektive energiniveauer, og vi kan tage elektronernes spinegenskaber i betragtning i modellen vha. af 'Pauli eksklusions princip'. Vi ved hver orbital og dermed dens tilstand kan, kun have op til 2 elektroner og spin kvantenummeret af 2 elektroner i en tilstand er modsatte (henholdsvis op og ned). Hermed kan de

¹³ UPB: Uendelige potentialbrønd forkortelse som heraf bruges.

¹⁴ Thomas, D. (s.d.). Lecture XIII: Particle in a box. Georgetown university.

antal delokaliserede elektroner sættes i tilstandenes energiniveauer med 'aufbau' princippet som følgende



Figur 12: Energiniveauerne i elektronskyen, hvor elektronerne fylder op fra orbitalerne nederst fra

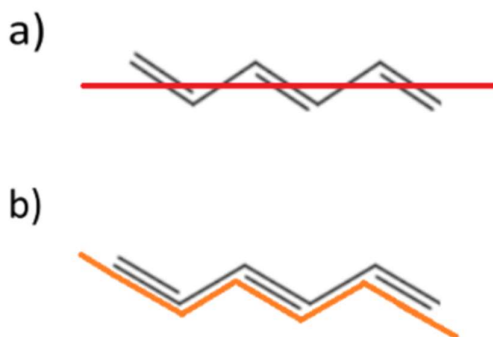
for Hexatriene med 6 delokaliserede elektroner, hvor n_{LUMO} er den laveste ikke fyldt orbital (Lowest unoccupied molecular orbital) og n_{HOMO} er den højst fyldt orbital (highest occupied molecular orbital).¹⁵

Ifølge vores model (Figur 11) kan energibåndet ΔE for absorptionen skrives vha. formel 7 således:

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_{LUMO}^2 - n_{HOMO}^2) \quad (9)$$

Hvor L er længden af brøndens bund som her er den virkelige længde af vores konjugerede kæde. Givet informationen, for Hexatriene er $n_{HOMO} = 3$ og $n_{LUMO} = 4$ (figur 12)

Det er dog lidt svært at afgøre længden af brønden for elektronen ind i π -elektronskyen. Man ved hellere ikke hvilken vej elektronen ville tage. Der er endda lidt uenighed om, hvad er længde egentlig i denne kontekst. For at illustrere er der mindst to måder man kan definere længden L på i denne situation:



Figur 13: (Molekyle set op fra). Enten kan længden af π -skyen beregnes som a (markeret med rød) eller b (orange) som er bare længden af bindingerne.

¹⁵ Klymkowsky, M. W.. & Cooper, M. M.. (s.d.). Chapter 8: Conjugated compounds and aromaticity

Der er valgt, at i opgaven beregne π -elektronsky længder ligesom a på figur 13, fordi elektronskyen ligger jo som rimelige lige sky uden nogle knæk i modsætning til b .

Hver karbon-karbon binding har en længde på ca. 144 pm. Hver Zigzag struktur med $C-C=C$, har en vinkel imellem på 120. Med sinusrelationen kommer man frem til den lineære distance mellem 1 $C-C=C$ er ca.

$$\frac{144 \text{ pm}}{\sin\left(\frac{\pi}{6}\right)} \cdot \sin\left(\frac{2}{3}\pi\right) \approx 249 \text{ pm}$$

Resten af opgaven benytter sig af denne definition af længde.¹⁶

Længden af brønden i Hexatriene bliver som følgende

$$L = 3 \cdot 249 \text{ pm} = 747 \text{ pm}$$

vi tager også tage i højde for at elektronskyen er lidt længere end selve molekylets længden ved at gange med 3 i stedet for gange med 2,5. Energibåndet og absorptionsbølglængde kan så beregnes vha. formel 10 og 8 som

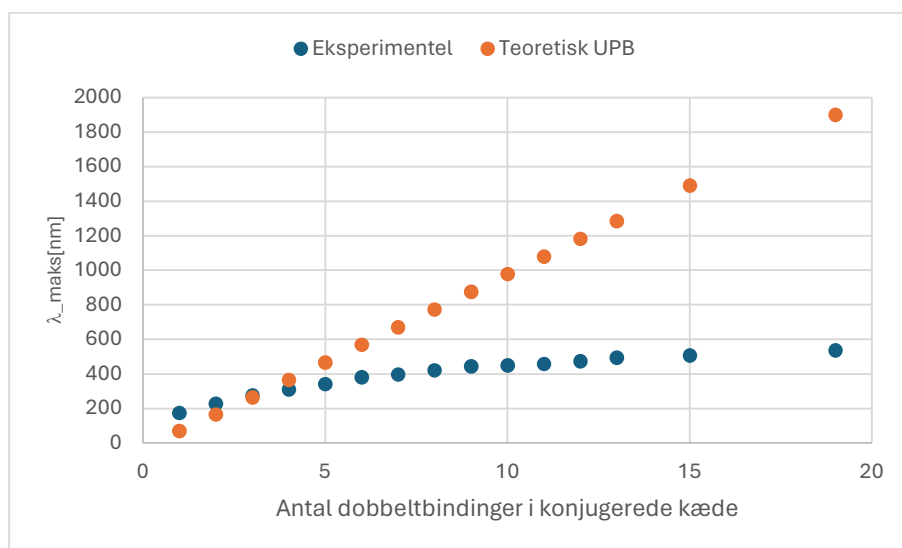
$$\Delta E = \frac{\pi^2 \left(1,055 \cdot 10^{-34} \text{ kg} \cdot \frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right)^2}{2 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (747 \cdot 10^{-12} \text{ m})^2} (3^2 - 2^2) \approx 7,53 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$\lambda_{maks} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot 3,0 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{7,53 \cdot 10^{-19} \text{ J}} \approx 264 \text{ nm}$$

Vi kalder heraf bølglængden λ_{maks} , da den teoretiske værdi afspejler jo, hvor der absorberes mest. I en eksperimentel absorptionskurve observerer man, at et molekyle absorberer lys i en større område, men det er klart absorptionskurvens toppunkt som viser, hvad der absorberes mest af og dermed anses λ_{maks} for at være absorptionsspektrumets mest fremtrædende linje.

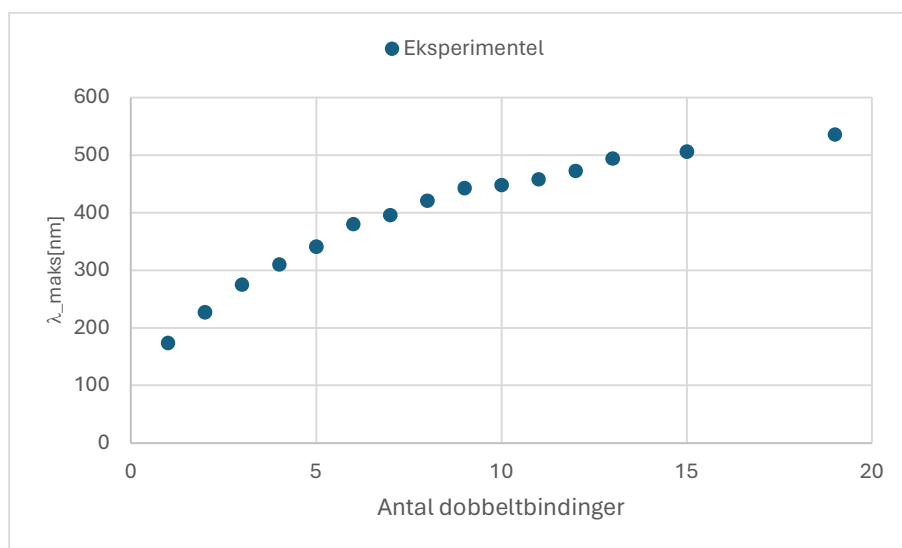
Man kan så udføre overstående beregninger med en hel række af molekyler med forskellige længder af konjugerede dobbeltbindinger.

¹⁶ Autschbach, J.. (2007, November). Why the Particle-in-a-Box Model Works Well for Cyanine Dyes but Not for Conjugated Polyenes, s. 1



Tabel 1: x-aksen viser antal dobbeltbindinger i den konjugerede kæde, dermed viser brøndens længde. (beregninger: bilag 2)

Lige for Hexatriene er vores teoretisk beregning virkelig præcis ift. de eksperimentelle fundet data, men det bliver værre jo længere kæden bliver.



Tabel 2: Samme tabel som tabel 1 bare kun med eksperimentel fundet data^{17 18}

I det hele taget formelen 10 viser at $\Delta E \propto \frac{1}{L}$ og $\Delta E \propto \frac{1}{\lambda_{maks}}$. Der er en ligefrem proportionelt sammenhænge mellem mest absorberede lys og længden af brønden, hvor elektronen er fanget i. Dette fortæller os, at jo længere vores konjugerede kæde er, jo mere er energien distribuerede i en stationære tilstand, og dermed jo lavere energibånd ΔE . Trodsalt er tendensen i modellen korrekt. Vi kan se virkeligheden (Tabel 2) forholder sig anderledes end modellen med ikke-perturberet UPB. I modellen stiger λ_{maks} lineært med at længden stiger. De eksperimentale værdier peger på bølglængden konvergerer jo højere molekylet bliver.

¹⁷ ARAKI, G.. & MURAI, T.. (1952). Molecular Structure and Absorption Spectra of Carotenoids

¹⁸ HIRAYAMA, K.. (1953). Absorption Spectra and Chemical Structures. I. Conjugated Polyenes and p-Polyphenyls.

Vi konkluderer, at ifølge modellen så bliver absorptionen af lyset mere og mere rødforskuet, jo længere den konjugerede kæde bliver, når vi bare antager at $V = 0$, og værdierne passer kunne i en lille interval præcis, dog i det hele taget er den overraskende præcis ift. vores antagelser til modellen.

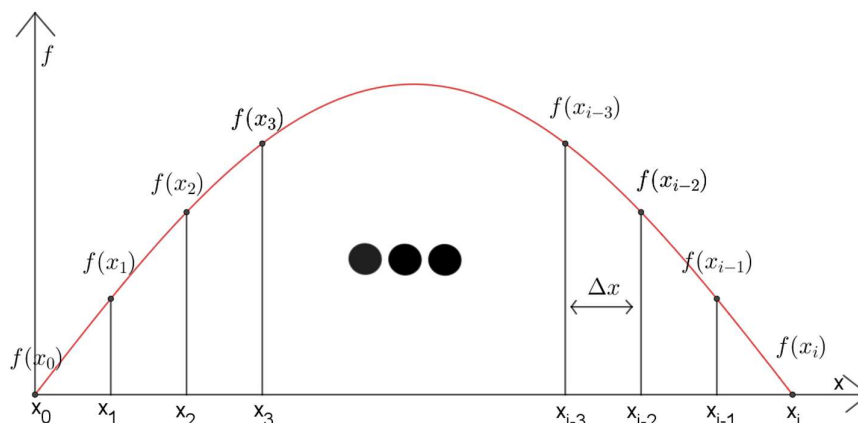
4.1. Simulering af den endimensionelle tidsuafhængige Schrödingerligning

For at vi kan forbedre vores kvantemekanisk model, så den kan beskrive lys absorptionen i molekyler med konjugerede dobbeltbindinger bedre, må vi på en måde til at regne på energiniveauerne givet en vilkårlig potentiale $V(x)$. Hermed kan vi prøve at komme med bud på, hvordan potentialet i den uendelige ser ud for de delokaliserede elektroner. Det ville også være meget interessant at se på sandsynlighedstætheden $|\psi(x)|^2$ af den delokaliserede elektron som giver os indblik i, hvordan elektronen opfører sig i potentialet.

Det er klart at Schrödingerligning ligesom mange andre differentialligninger har ikke en analytisk løsning for et hvert givent potential. Det er hermed relevant at vi bruger en numerisk metode til at løse schrödingerligningen for at simulere bølgefunktionerne og dens tilsvarende energi egenværdier numerisk givet en vilkårlig potentialenergifunktion $V(x)$. Der er utallige numeriske metoder for at simulere løsninger til Schrödingerligningen. En række af forskellige numeriske metoder blev overvejet som udgangspunktet af simuleringen, da hver metode har sin eget fordele og ulemper.

I undersøgelsen er der valgt at bruge *Finite Difference-metoden* til at approksimere differensligningen, også løses for tilstandene med deres hver enkelt energiniveau som en egenværdiproblem.

Finite Difference-metoden bygger på, at de afledede led i differentialligningen approksimeres med differenskvotient, men dette kræver at vi *diskretisere* vores differentialligning¹⁹. Dette gøres ved at dele funktionen, vi løser for i differentialligningen, $f(x)$ defintionsmængde op i i stykker til, at så antage kun nogle bestemte diskrete værdier x_j , hvor $j = 0, 1, 2, 3, \dots, i$. Dermed er $f(x)$ defineret over en diskret interval.

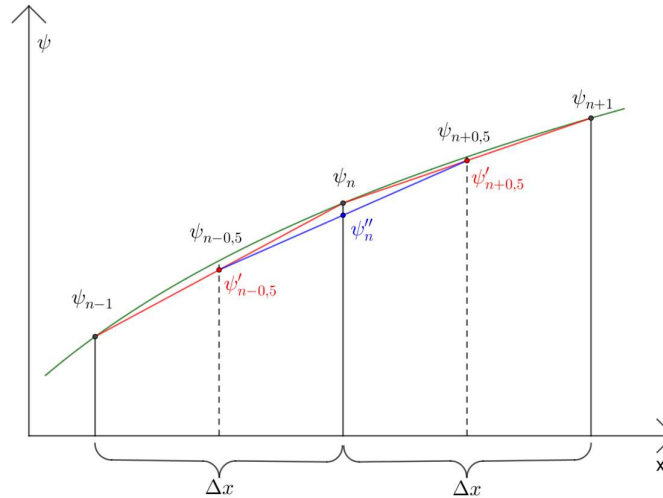


Figur 14: side om side sammenligning mellem den kontinuerte funktion f , og de diskrete værdier fra x_0 til x_i . De 3 sorte prikker viser mønstret i diskrete værdier går videre i midten indtil enden. Jo flere diskrete punkter vi har, jo bedre approksimation vi får af den kontinuerte funktion.

¹⁹ Rasmussen, M. G: (2016, 13. November). Matematisk modellering og numeriske metoder, s. 3-4

Differentialligning konverteres til en *differensligning*, og kort sagt for hver iteration så beregnes f_{i+1} , men i vores tilfælde beregnes alle funktionsværdierne f_j på en gang vha. en egenværdiproblem som er tidsmæssig effektiv.

Hermed pointen er, at i den tidsafhængige schrödingerligningen som indeholder, en $\psi''(x)$ led så gør *Finite Difference-metoden* det nemt at approksimere ledet diskret. Over en meget kort diskret interval ser $\psi(x)$ sådan ud:



Figur 15: approksimation af den 2. ordens tangenthældning(blå).

I figur 2 viser den grønne funktion $\psi(x)$ kontinuert. Figuren viser, hvordan 2. differentialledet bliver beregnet tilnærmelsesvis i det diskrete punkt ψ_n , hvor vi bruger de røde tangenthældning til at beregne den 2. tangenthældning i ψ_n .

For at finde 1. orden differentialledet i punktet ψ_n må vi approksimere tangenthældning således

$$\psi'_n = \frac{\Delta\psi_n}{\Delta x} \approx \frac{\psi_{n+0,5} - \psi_{n-0,5}}{\Delta x}$$

Og for 2. ordens differentialledet ψ''_n bliver approksimeret således

$$\psi''_n \approx \frac{\Delta\psi'_n}{\Delta x} = \frac{\psi'_{n+0,5} - \psi'_{n-0,5}}{\Delta x} = \frac{\frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta x} - \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\Delta x^2}$$

Dette kaldes den centrale andenordens differenskvotient²⁰.

Være opmærksom på værdierne for ψ_n , ψ_{n+1} eller ψ_{n-1} , findes ved at løse for en egenværdiproblem²¹.

I det hele taget kan metoden hovedtrin opsummeres som følgende:

- Diskretisere differentialligning
 - o Herunder approksimere differentialledet vha. *Finite Difference-metoden*
- Skriv differensligningerne som en lineær ligningssystem
- Tage i højde for grænsebetingelserne
- Løs for tilstande $|\psi\rangle$ med tilsvarende energi E som en egenværdiproblem

²⁰ Rasmussen, M. G: (2016, 13. November). Matematisk modellering og numeriske metoder, s. 4

²¹ Hill, E.. (s.d.). Setting up the discrete Schrödinger equation [Artikel]. University of Redlands

Vi har Schrödingerligningen skrevet på følgende måde:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (10)$$

Og i tilfælde af en kvantepartikel i en uendelige potentialbrønd har vi så grænsebetingelserne

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

hvor brønden strækker sig fra 0 til L som er længden af boksen. Der gælder $x \in [0; L]$. Først omskriver vi formel 11 så 2. orden differentialledet står uden konstanter

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} V(x)\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x)$$

Hermed diskretiserer vi udtrykket.

Vi deler hele brønden i N ligestor stykker, og det medfører, at x kan kun tage diskrete værdier som vi kalder x_n med mellemrummet Δx for hver diskret trin. Det gør, så at ψ tager kun diskret værdier $\psi(x_n)$. Vi definerer $\psi_n \equiv \psi(x_n)$.

Vores ligning i diskret form bliver

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_n + \frac{2m}{\hbar^2} V_n \psi_n = \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_n$$

Vi ville nu finde approksimation for andenordens stedaflædte led $\psi''(x_n)$. Til dette bruges den centrale andenordens differenskvotient, som vi diskuterede i starten. Differensligningen bliver

$$-\frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\Delta x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_n \psi_n = \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_n$$

Dette udtryk omskrives på en bestemt måde:

$$-\frac{1}{\Delta x^2} \psi_{n+1} + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_n \right) \psi_n - \frac{1}{\Delta x^2} \psi_{n-1} = \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_n$$

Man har så følgende lineær differensligningssystem, hvor vi skal løse for ψ_1 til ψ_{n-1} også E :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\Delta x^2} \psi_2 + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_1 \right) \psi_1 - \frac{1}{\Delta x^2} \psi_0 &= \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1 \\ -\frac{1}{\Delta x^2} \psi_3 + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_2 \right) \psi_2 - \frac{1}{\Delta x^2} \psi_1 &= \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_2 \\ -\frac{1}{\Delta x^2} \psi_4 + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_3 \right) \psi_3 - \frac{1}{\Delta x^2} \psi_2 &= \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_3 \\ &\vdots \\ -\frac{1}{\Delta x^2} \psi_n + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_{n-1} \right) \psi_{n-1} - \frac{1}{\Delta x^2} \psi_{n-2} &= \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_{n-1} \end{aligned}$$

Og differensligningssystemet kan skrives i en symmetrisk tridiagonalt matrix på følgende måde som en matrixligning:

$$\begin{bmatrix} \frac{2}{\Delta y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_1 & -\frac{1}{\Delta y^2} & 0 & 0 & \dots \\ -\frac{1}{\Delta y^2} & \frac{2}{\Delta y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_2 & -\frac{1}{\Delta y^2} & 0 & \dots \\ 0 & -\frac{1}{\Delta y^2} & \frac{2}{\Delta y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_3 & \ddots & 0 \\ 0 & \vdots & \ddots & \ddots & -\frac{1}{\Delta y^2} \\ \dots & \dots & 0 & -\frac{1}{\Delta y^2} & \frac{2}{\Delta y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_{n-1} \end{bmatrix} = \frac{2mE}{\hbar^2} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_{n-1} \end{bmatrix}$$

Læg mærk til at vi slettet alle led som tilhører den første og sidste element henholdsvis ψ_0 og ψ_n i matrixen og differensligningssystem, da vi ved fra vores grænsebetingelser, at de skal være lige med 0, så på denne måde har vi også taget højde for grænsebetingelserne.

Dette er nemlig vores egenværdiproblem, hvor matrixen $\hat{\mathcal{H}}$ i overstående har egenvektoren $|\psi\rangle_t$ som er tilstanden t med dens respektive egenværdi $\frac{2mE_t}{\hbar^2}$. Egenværdiproblemet kan skrives som ligningen:

$$\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle_t = \lambda_t |\psi\rangle_t \quad (11)$$

Hvor $\lambda_t = \frac{2mL^2 E_t}{\hbar^2}$. Husk vi kender kun matrixen $\hat{\mathcal{H}}$ og vi skal løse tilhørende $|\psi\rangle$ og λ for matrixen.

Matrixen løses i computeren med en enkelt funktion, og man får med det samme en lang række $|\psi\rangle_t$ hvor t er den t 'te stationære tilstand med dens tilhørende egenværdi λ_t , hvor man regner for energiniveauet $E_t = \frac{\lambda_t \hbar^2}{2m}$.

Vi bliver også nødt til at normalisere tilstanden, før vi kan regne sandsynlighedstæthed. For hver tilstand må vi finde normaliseringsskalaren k . Vi kan sige

$$|\psi\rangle_{tn} = k \cdot |\psi\rangle_t$$

hvor $|\psi\rangle_t$ er den ikke-normaliseret egenvektor, og $|\psi\rangle_{tn}$ er den normaliseret tilstand. Vi finder normaliseringskonstanten k således som følgende

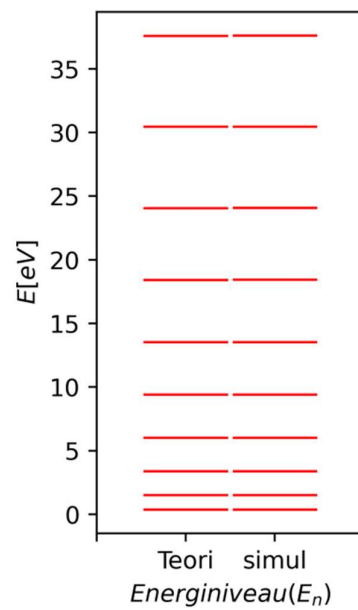
$$||\psi_{tn}\rangle|^2 = \int_0^L |\psi_{tn}(x)|^2 dx = 1 \Leftrightarrow \int_0^L |k \cdot \psi_t(x)|^2 dx = 1 \Leftrightarrow k = \frac{1}{\sqrt{\int_0^L |\psi_t(x)|^2 dx}}$$

Vi konkluderer at den normaliseret tilstand skrives som

$$|\psi_{tn}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\int_0^L |\psi_t(x)|^2 dx}} \cdot |\psi\rangle_t$$

Vi viser ikke egenvektorerne (selve tilstandene), $|\psi\rangle_{tn}$, men vi viser i undersøgelsen kun sandsynlighedstætheden af de normaliseret tilstand $||\psi\rangle_{tn}|^2$, da ifølge vores statistisk fortolkning, har den stor betydning for, hvor ville elektronen mest sandsynlig befinde sig.

Vi kan sammenligne de teoretiske energiniveauer fra formel 6 med en den flade bund UPB simuleret. I simulationen får vi de først 20 energinivuer fuldstændig ens med teoretiske værdier op til 3 cifres præcision beregnet i eV .



Figur 16: sammenligning mellem den analytisk energiniveauer (Teori) og de simulerede UPB med $V = 0$

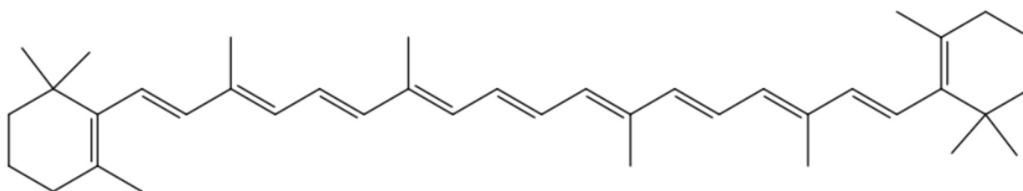
Koden ligger som bilag 3.

5. Forsøg

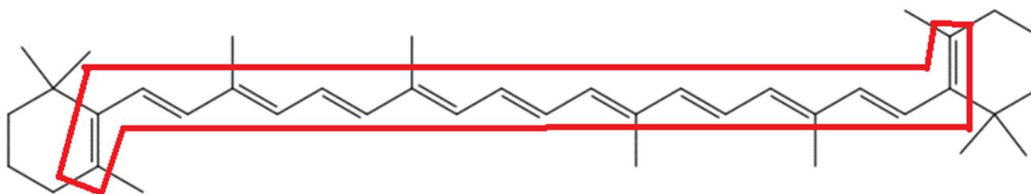
Vi måler et stofs absorptionspektrum ved at lave spektrofotometrianalyse over stoffet. I vores tilfælde ville vi lave spektrofotometri over molekylet Beta-Caroten. Fra blot en absorptionskurve af stoffet kan vi nemt finde hvilke bølgelængder af lys bliver mest exciteret af stoffet. De topper der er på en absorptionskurven viser jo nemlig hvilke bølgelængde lys har lavest transmission og dermed højst absorption. I afsnit 3.2 blev der forklaret, at absorption og excitation af lys i form af fotoner var et kvantemekanisk fænomen, hvor elektroner hoppede fra en lavere energiniveau til en højere energiniveau (exciteret tilstand). Elektronen hopper så tilbage til grundtilstanden, og der bliver udsendt lys som vi observerer i denne forsøg med et spektrofotometer.

Formålet med forsøget er at bestemme absorptionspektrummet af et farvestof med konjugerede dobbeltbindinger, og derefter sammenligne den eksperimentelle absorptionspektrum med den vores teoretiske modeller. Herfra kan vi vha. den eksperimentelle absorptionskurve forbedre model ved at lave perturbationer i modellen.

Vi har valgt Beta-Caroten som er en rigtig god stof at undersøge ift. vores modellering.



Stoffets er stærk orangefarvet og molekylet indeholder kun hydrogen og karbonatomer. Der er ingen chromofore eller auxchromofore, så farvet kan næsten kun forklares som en konsekvens af den lange kæde af konjugerede dobbeltbindinger.



Her har vi markeret med rødt, hvor den overlappende π -elektronsky, nogenlunde ligger. Der er her en delokaliserede elektron kan bevæge så nogenlunde frit. Mere specifikt er det for beta-Caroten 22 delokaliserede elektroner.

Siden molekylet er orangefarvet, så kan vi forvente, at Absorbansen ville være højst i den blålige område. Efter måling ville vi kemisk prøve at bryde de konjugerede dobbeltbinding ved at tilføje meget små mængde af bromvand. Bromvand er nemlig kendt for at have en bestemt kemisk evne til at bryde konjugerede dobbeltbindinger op.

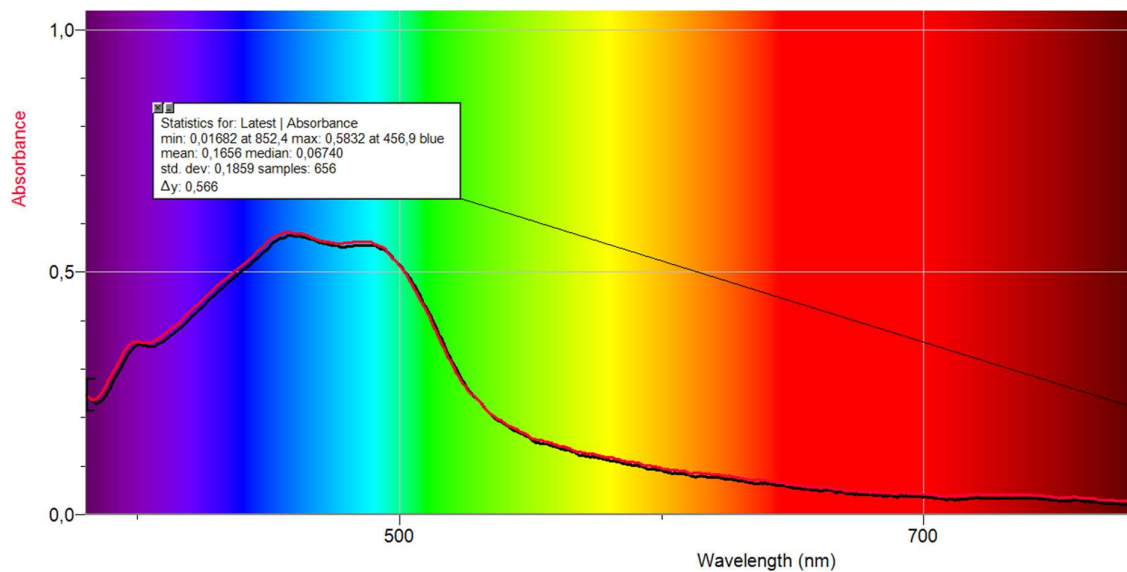
Forestil jer vi bryder en dobbeltbinding i midten op. π -elektronskyen brydes op i 2 mindre stykker. Som konsekvens har delokaliserede elektron ikke lige så meget plads, dvs. længden bliver mindre.

Det medfører, at det absorberede lys bliver blå forskudt. Hvis den bliver blåforskudt nok, så går den i UV-spektrum, og det resulterer i at stoffet mister sin farve.

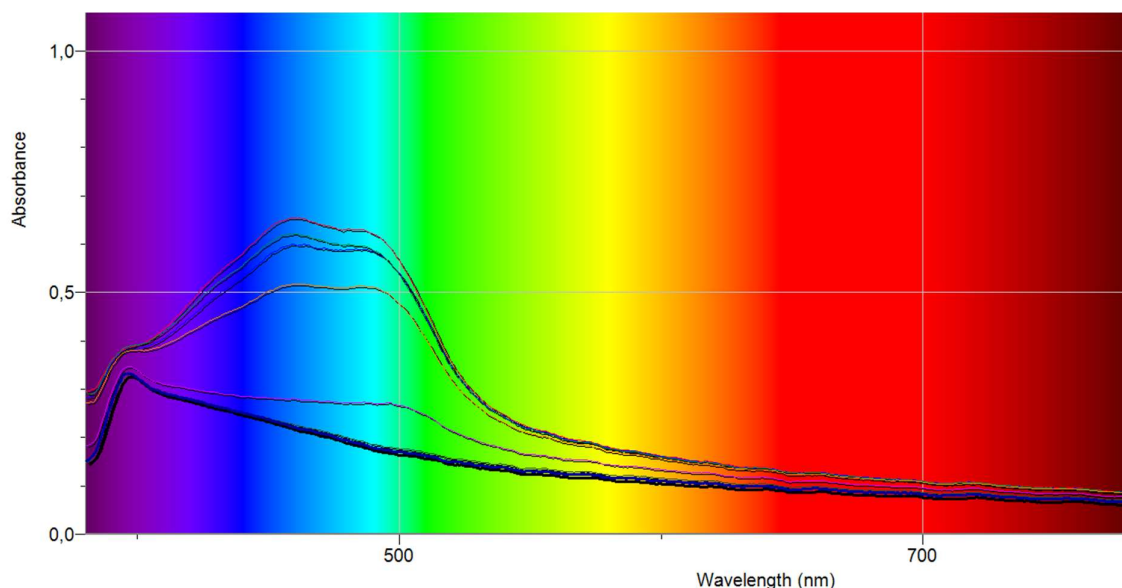
5.1. Fremgangsmåde

- Der laves en opløsning med en koncentration på $0,2 \frac{mg}{mL}$ af beta-Caroten e-160 i vand.
- Spektrofotometeret kalibreres
- Absorptionskurven beta-Caroten måles vha. spektrofotometeret.
- Derefter tilføjer vi en dråbe dibrom-vand og vi observerer på spektrofotometeret, hvordan absorptionskurven ændrer sig ift. tiden.

5.2. Resultater



Figur 17: absorptionskurve af lav koncentration beta-Caroten med tilføjet statistisk info



Figur 18: absorptionskurve af lav koncentration beta-Caroten. Den højeste kurve er ikke tilføjet Bromvand. For hver dråbe af Bromvand tilføjet, er det taget en billede af absorptionskurven. Man ser, at Absorbansen af beta-Caroten bliver stødt mindre for hver dråbe Bromvand der tilføjes

5.3. Efterbehandling

Eksperimentel er λ_{maks} blevet bestemt til 456,9 nm fra figur 1, og i figur 2 den højeste kurve som ikke er tilføjet Bromvand er λ_{maks} blevet bestemt 458,6 nm, så vi har gennemsnitlige eksperimentel bestemt λ_{maks} på ca. 458 nm.

Vi laver også teoretisk beregning af λ_{maks} vha. den uendelige potentialebrønd hvor $V = 0$.

For beta-Caroten bliver længden

$$L = 11 \cdot 249 \text{ pm} \approx 2740 \text{ pm}$$

Absorptionsbåndet Og bølglængden bliver

$$\Delta E = \frac{\pi^2 (1,055 \cdot 10^{-3} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{2(9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(3,014 \cdot 10^{-9} \text{ m})^2} (12^2 - 11^2) \approx 1,84 \cdot 10^{-1} \text{ J}$$

$$\lambda_{maks} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot 3,0 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{1,84 \cdot 10^{-19} \text{ J}} \approx 1080 \text{ nm}$$

Denne resultat er også sat ind i tabel 1.

5.4. Diskussion

På figur 1 kunne vi se, at beta-Caroten absorberede mest i bølglængderne mellem ca. 430-500 nm som også forklar beta-carotens farve. Fra figur 1 og 2 fandt vi en gennemsnitlig λ_{maks} på 458 nm, og det passer også nogenlunde med resultater fortaget af andre kilder²².

Sammenligning af det eksperimentelle λ_{maks} med den beregnet teoretiske værdi viser os at vores model er 842 nm højere end eksperimentelle bestemt værdi. Modellen, den uendelige potentialbrønd med flad bund, er brudt sammen for en så lang molekyle. Vi har altså brug for en bedre model.

²² Autschbach, J.. (2007), s. 3 ($\lambda_{maks} = 453 \text{ nm}$)

Noget der savnes i forsøget, som ses i figur 1, er en mere tydeligt absorptionstop i området 430-500 nm, fordi så var målingen mere sikkert. Det betyder ikke det spektrofotometret allerede har målt er dårligt, men toppen af kurven, λ_{maks} , er i hvert fald ikke fuldstændig tydeligt. For en tydeligere kurve i det højabsorberende område burde man have brugt lidt højere koncentration af beta-Caroten.

Fra figur 2 kan der konkluderes, at man ser effekten af Bromvand som skærer den fulde π -elektronsky over i beta-Caroten tydeligt, og dermed kan vi se, at Absorbansen falder. Dette er selvfølgelig under det kemiske betragtning, at Bromvand bryder konjugerede dobbeltbindinger op.

I det hele taget resultatet fra figur 2 overensstemmer med vores model, fordi vi observerer, at når vi gør brønden kortere, så bliver lyset højst sandsynligt mere blåforskuet. Dette ses bare ikke, fordi vi har spektret, kun måler i synlig område. Vi kan dog have en formodning om, at i denne tilfælde ville λ_{maks} ligge et eller andet sted i det UV eller over UV området efter tilføjelsen af bromvand.

På figur 2 kan man også se bromvandets spor. Vi observerer at den laveste kurve(markeret med mørkeblåt) ikke ligger ved 0 Absorbans, men har en svag top(Absorbans på ca. 0,3) i det lilla område. Bromvand er let gulligt i sig selv, og toppen tilhører nok bromvand da komplementærfarven af gul er lilla og det betyder at absorptionen i det synlige område ved sidste måling kan forklares ved det tilføjet mængde af Bromvand.

6. Indføring af perturbationer

Før vi kan bruge vores simulering til indføre nogle ændringer som passer med vores valgte molekyle, er der nogle simplificerende antagelser som vi have lavet i gennem opgaven:

- Læg mærk til at i vores model ser vi fuldstændigt bort fra elektron-elektron frastødning ind i π -elektronskyen.
- Problemet er undersøgt udelukkende i en dimension hvor elektron bevægelser sig kæden.
- I vores undersøgelse tager vi kun udgangspunkt i molekyler der indeholder kun Carbon og hydrogen. Andre grundstoffers virkning på absorptionskurve kan ikke forklares med vores model. Undersøgelsen af molekyler som har andre atomer i sig, kan medføre til fejl i form af *støj* i vores model.
- I virkeligheden er brønden, hvor elektronen er fanget faktisk endeligt. I virkeligheden hvis elektronen tilføjes nok energi så ville elektronen blive ioniseret, altså bryde sig frit og være en fri partikel.
- Vi laver Antagelsen om at længde er defineret som efter en lige lang elektronskyen gennem midten af den konjugerede kæde.
- Fra de eksperimentale Vi kan se den teoretiske uendelig potentialbrønd bryder sammen jo længere molekylet er. Der er tilsyneladende en tendens fra eksperimentel optaget data som peger på, at λ_{maks} konvergerer.
- Potentialet burde være nogenlunde uniform i kæden, da molekylets konjugerede kæder er nogenlunde symmetrisk i en lige struktur.

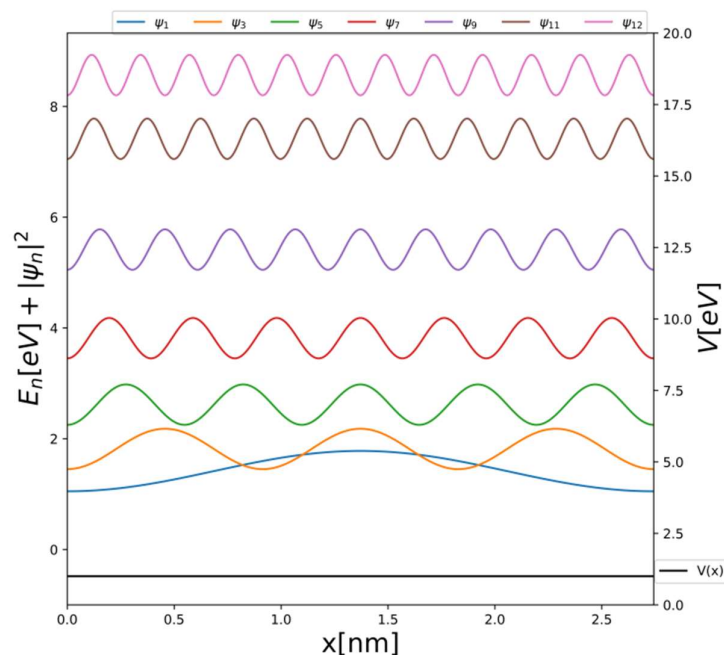
Med disse i tankerne kan vi indføre nogle ændringer i potentialet. vi optimerer brøndens bund ved at simulere schrödingerligningen for forskellige potentialer $V(x)$ i opgaven, så vi får en nogenlunde realistisk energinivauer og billede over, hvordan en elektron opfører sig i sådanne struktur. Vores simulation tager kun udgangspunkt i Beta-Carotene, da vi havde selv målt dens λ_{maks} på ca. 458 nm.

I forhold til simulering har vi ladet længden af brønden $L = 2,74 \text{ nm}$, og vi beregner ΔE som difference mellem den 12. og 11. energiniveau også λ_{maks} . Til hver funktion $V(x)$ som vi afprøver har vi introduceret en parameter μ , og det er en konstant foran og viser hvor stærk er potentialet er ift. længden. Parameteret har en helt afgørende rolle i vores vurdering.

Der blev afprøvet med rigtige mange potentialer. Kun de vigtigste er taget med som vist herunder.

Model nr.	$V(x)$	μ	λ_{maks}
1	$\mu \cdot Lx$	11	$\approx 455 \text{ nm}$
2	$\mu \cdot \cos\left(\frac{22\pi x}{L}\right) + \mu$	2.2	$\approx 459 \text{ nm}$
3	$\mu \cdot \left \frac{L}{2} - x\right $	55	$\approx 477 \text{ nm}$
4	$\mu \cdot \left \cot\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right $	27	$\approx 455 \text{ nm}$
5	$\mu \left(\left \frac{L}{2} - x\right - \cos\left(\frac{43\pi x}{L}\right)\right) + \mu$	43	$\approx 452 \text{ nm}$

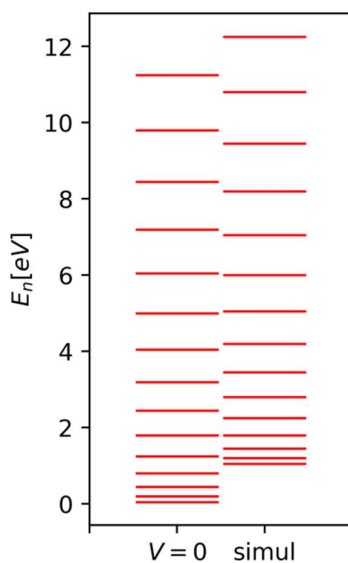
For simuleringsresultaterne er der lavet nogle bestemte diagrammer, så brønden kan visualiseres på en overskuelig måde. Her er den lavet for en UPB, hvor $V(x) = 1$.



x-aksen viser stedet ind i brønden. Den højre y-akse viser potentialenergi beregnet i eV. I den nedre højre hjørne har vi også markeret selve funktionen $V(x)$ og dens farve som er **altid** sort i diagrammet.

y-aksen på venstre viser selve tilstandenes sandsynlighedsfordeling $|\psi_n|^2$, hver med sin farve. For at de ikke overlapper hinanden, er der summet tilstandens beregnet energiniveau E_n på hver tilstands sandsynlighedsfordeling $|\psi_n|^2$. Hver tilstand har sin eget energiniveau og konstanten gør så tilstandene ses overskueligt. Være opmærksom på vi har tegnet hver anden tilstand med ulige nummer også har vi tilføjet den 12. Det er, fordi når vi undersøger Beta-Caroten er vi meget interesseret i springet fra den 11. til 12 energiniveau, henholdsvis den brune og lyserøde i diagrammet.

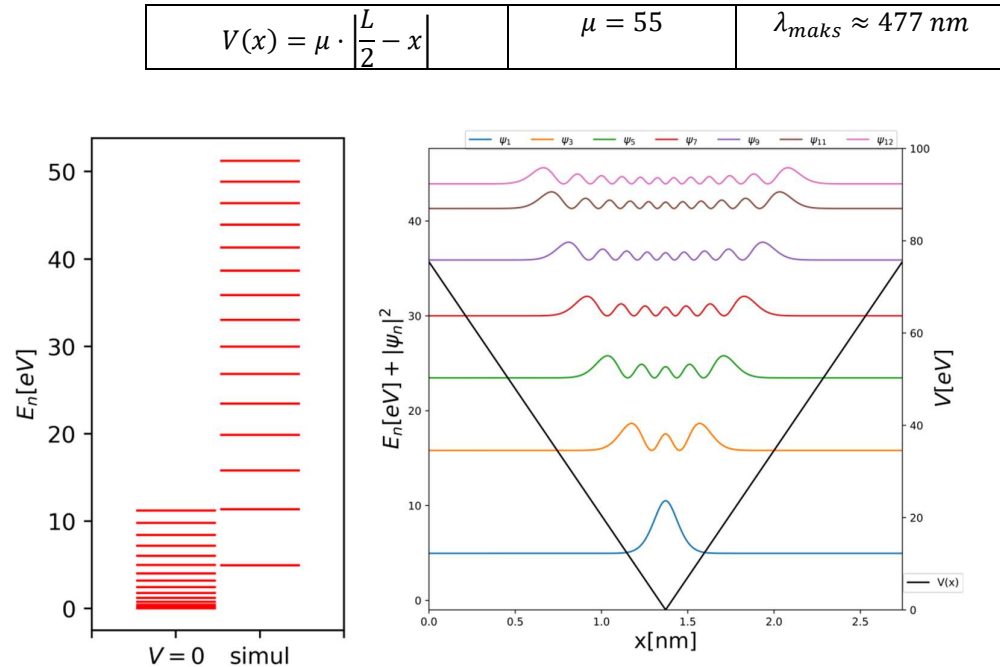
Så er der også vist energiniveauerne i sit eget diagram.



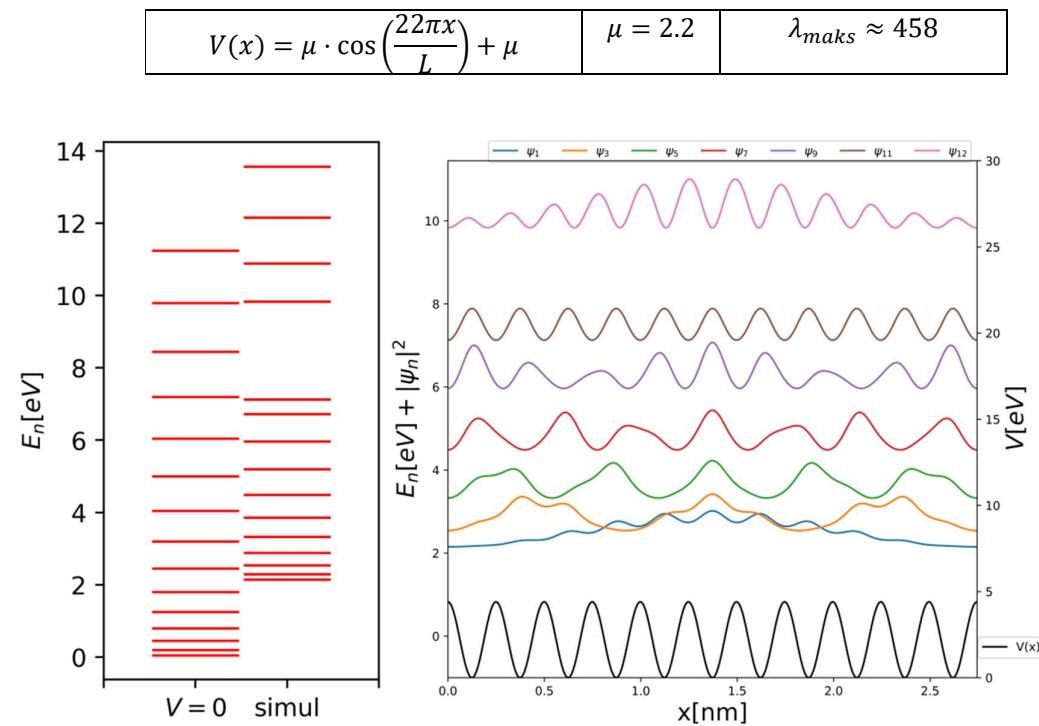
Der er to søjler, den på venstre viser de første 15 analytiske beregnet energiniveauer i flad bundet UPB. Den højre er de simuleret energiniveauer.

6.1. Simuleringsresultater

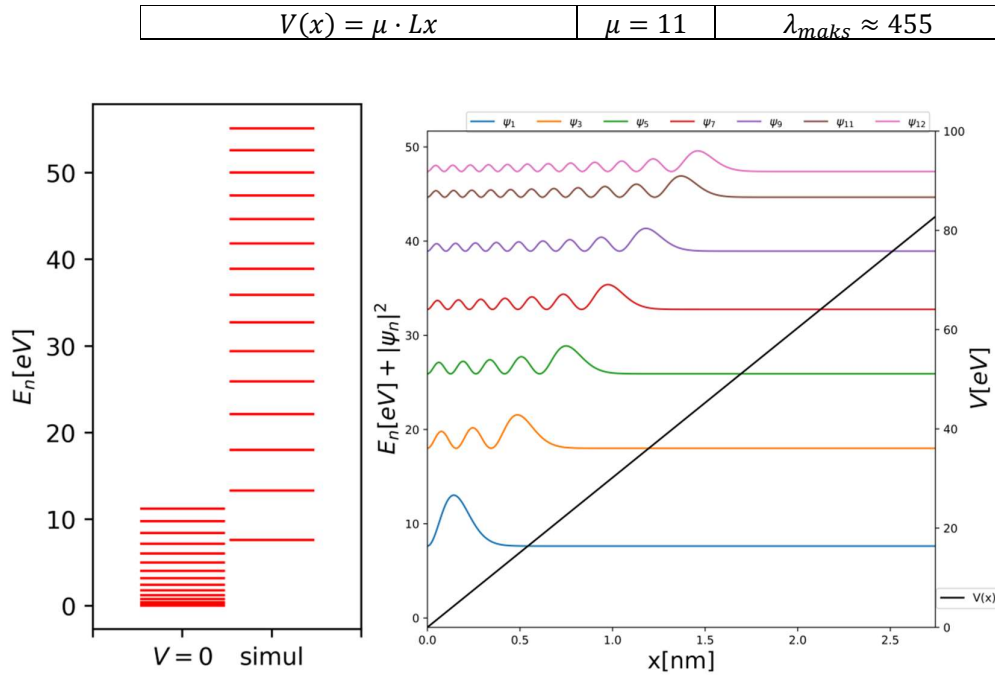
Model nr. 1)



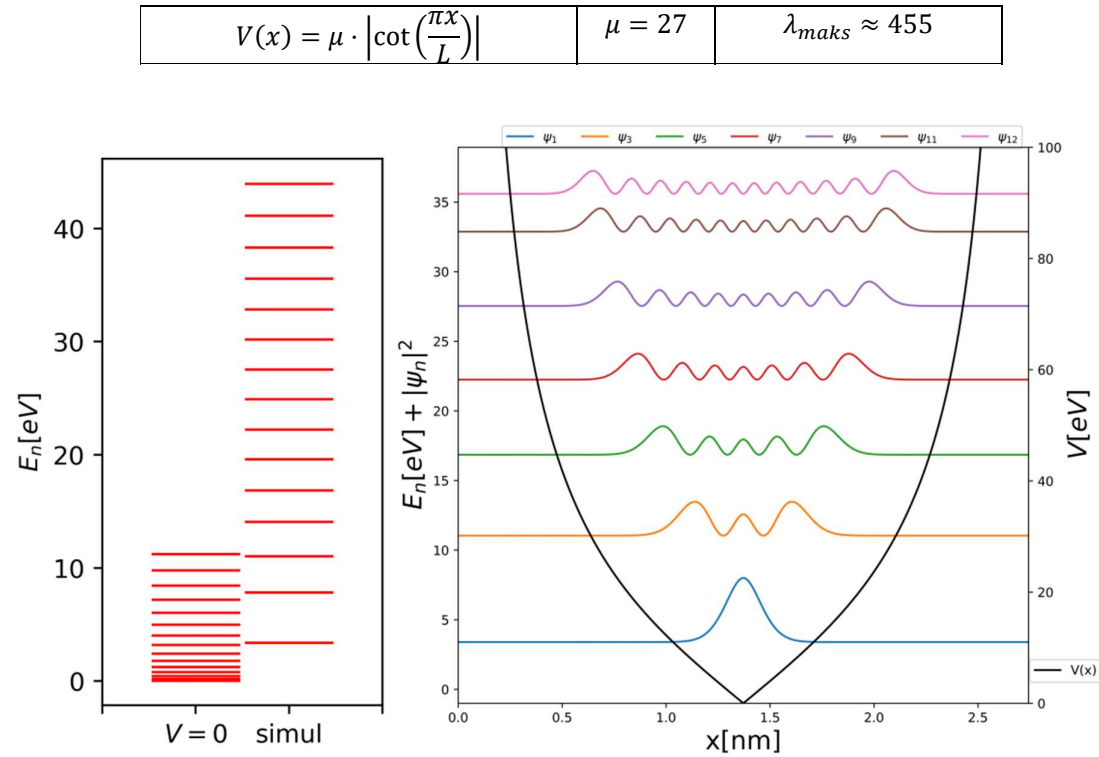
Model nr. 2)



Model nr. 3)

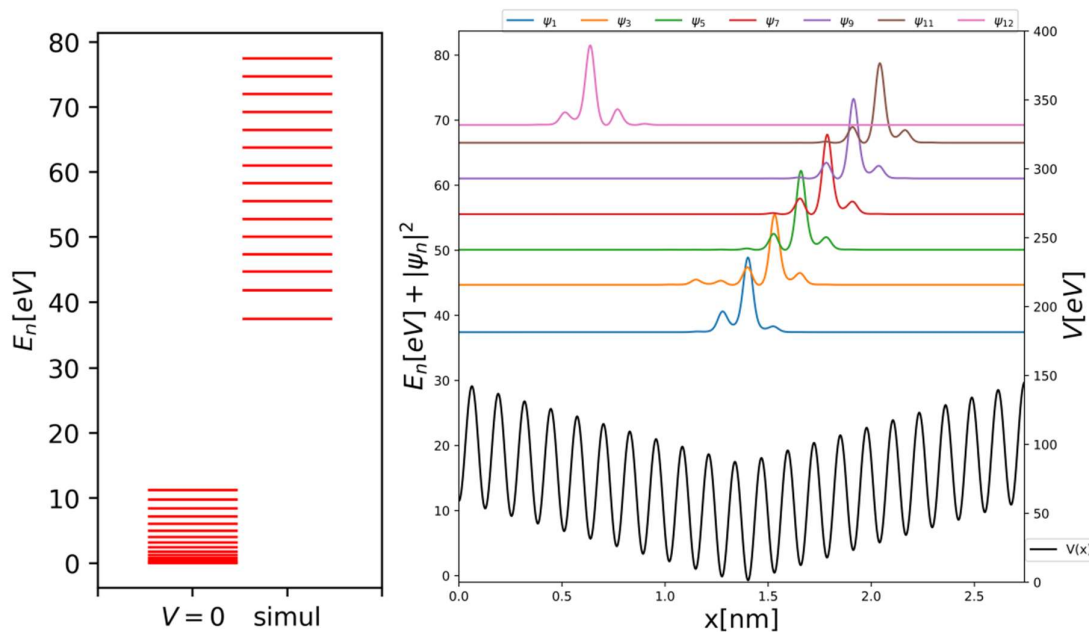


Model nr. 4)



Model nr. 5)

$V(x) = \mu \left(\left \frac{L}{2} - x \right - \cos\left(\frac{43\pi x}{L}\right) \right) + \mu$	$\mu = 43$	$\lambda_{maks} \approx 452$
---	------------	------------------------------



6.2. Vurdering af modeller

Det første som opdages, at ved den rigtige justering af μ så får man den rigtige λ_{maks} som viser beta-Carotenens lys uanset hvilke $V(x)$ man bruger. Det viser, at i det hele taget så skal der kun laves "små" perturbationer i den analytiske UPB før man kan modellere de konjugerede kædes absorptions ret præcis. Man kan med ret stor sikkerhed se, de konjugerede kæder kan modelleres udefra perturberede UPB, men der er så uendelige mange forskellige potentialer som viser "virkeligheden". Dette kan ikke rigtigt passe og der burde ikke kun fokuseres på λ_{maks} .

Der burde også være en begrænsning for, hvor meget μ må blive justeret på. Matematisk er μ faktoren foran potentialet. Den er i opgaven **tilpasset** til at vise virkeligheden. Fysisk burde μ vise jo hvor stærk potentialet uafhængigt af formen for potentialet. Den er afhængigt af kædens længde, og burde være forskellig ift. det konjugerede systems længde. μ må altså have en fysisk signifikans, dermed må eksistere. Det er dog meget svært at afgøre værdien eller endda mening med μ i vores *simple* model. Vi har allerede også gjort andre simplificerende antagelser og sådant defineret længden og energispringet som approksimationer.

Alligevel burde diskussionen hermed ligge i om vores modeller giver mening for virkelighed med alle de simplificering. Man kan hurtigt udelukke flere af potentialerne bare, hvis man kigger på elektronens sandsynlighedstæthed. Bl.a. kan vi se at på model 5 at elektronen er for hver energiniveau fanget i sin eget lille brønd, og for hver energiniveau hopper elektronen i en anden. Dette kan ikke være rigtigt da modellen går imod tanken om at elektronerne er delokaliserede i sådanne kæde og kan bevæge sig frit. Vi kan også se på model 3. Den er lidt anderledes end andre, fordi det høje potential i den højre side dvs. elektronen ville helt klart helt være i den anden side. Der blev også prøvet andre potential som havde lignende effekt, men der er noget galt. Hvis dette er tilfældet for Beta-Caroten, så ser jo tilstandene også på samme ud for meget mindre molekyler. Dette kan ikke helt være tilfældet da der ses ingen grund til, hvorfor en delokaliserede elektron mellem 2

karbonatomer burde have en præference for sin tilknytning til en atom. Sandsynligheden for at finde elektronen burde være ligeligt fordelt. Der er dog nogle molekyler med delokaliserede ringstruktur i enden af atomet. I denne tilfælde muligheden for at en elektron ville helst befinde sig i den ene side af brønden kan ikke udelukkes. Model 1, 2 og 4 er de mere interessante modeller. Model 1 og 4 ligner en del hinanden da begge peger i retningen af, at elektronerne ville højst sandsynligt befinde sig i midten, og har en lavere chance for at findes i molekylets ender. Der er dog en forskel, da model 4 så divagerer V til uendelige ved brøndens ender. Dette kan ikke være sandt, men er mere realistisk end model 1. Model 4 kan være virkelighedsnært, men så viser modellen, at elektronen kan næsten ikke findes ved enderne af molekylet.

Model 2 er faktisk den mest interessant. Den har en små μ -værdi og potentialet er bare en helt simpelt periodisk funktion. Tallet 22 i cosinusets argument er hellere ikke helt tilfældigt. Som vi husker, strækker Beta-Carotens elektronsky over 22 karbon kerner. cosinusets argument blev også testet med andre tal og der blev justeret en del med μ uden at få noget tilstrækkelig lignende. Noget der også er underligt, er energispringet fra den 11. til 12. energiniveau er betydelig større end alle andre. Den 11. tilstands sandsynlighedsfordeling er meget symmetrisk som viser at elektronens sandsynlighed er ligeligt fordelt blandt kernerne, hvorefter når elektroner hopper til den 12. tilstand er den igen mere tilbøjeligt til at befinde sig mest i midten. Model 2 ser ud at være den mest logiske model.

Man kan i hvert fald sige den uendelige potentialbrønd kan modellere elektronen i en konjugerede kæde, og dermed beskrive absorptionskurven af molekylet baseret på at molekylet indeholder kun Karbon og hydrogen atomer.

Modellen er dog ikke konklusivt og afhænger meget af ens definition af parametre. Vi har dog gennem modellerne fundet ud af, at potentialet burde være nogenlunde uniform med små fluktuationer, og den burde være lidt højere i enderne, som medfører til at elektronen ville i højere grad befinde sig midt i den konjugerede kæde.

7. Konklusion

Schrödingerligningen blev løst i tilfælde af den uendelige potentialbrønd. De analytiske løsninger blev så brugt som en model til at undersøge, hvorvidt elektronernes energiniveauer i et farvestof kunne modelleres og dermed forudsige farvestoffets absorptionsspektrum. Opgaven kiggede på farvestoffer som indhold lange kæder af konjugerede dobbeltbindinger.

I denne sammenhænge blev farvestoffet Beta-Caroten undersøgt vha. spektrofotometri, og absorptionsspektrummet blev målt med en λ_{maks} på ca. 458 nm. Der blev desuden i forsøget brugt en lille kemisk metode til at skære dobbeltbindinger over og farvestoffet mistede hurtigt dens farve. Dette passede med den uendelige potential brønds forudsigelse om at en kortere konjugerede kæde resulterede i lyset blev blåforskuet i UV område. Dog var der ikke mulighed for UV-spektroskopi så dette blev ikke eksperimentel bekræftet.

Den uendelig potentialbrønd med $V(x) = 0$ forklarede også i høj grad rødforskydning af lyset i molekyler med konjugerede dobbeltbindinger, men modellens forudsigelse var $\lambda_{maks} \approx 1090 \text{ nm}$ for beta-Caroten som er langt højere end den virkelige værdier. Modellen forudsiger passeret ikke helt. Modellen blev også sammenlignet med andre farvestoffer der indhold forskellige længder af konjugerede kæder. Det viste sig modellen kun holdt i en meget lille interval.

Schrödingerligningen blev simuleret vha. *Finite-difference metoden*, og adskillige potentialer blev simuleret som også gav korrekte værdier for beta-Caroten, dog blev der fundet kun en model som gav mest fysisk mening. Mere specifikt havde var modellens potentialfunktion

$$V(x) = 2,2 \cdot \cos\left(\frac{22\pi x}{L}\right) + 2,2$$

Med en beregnet λ_{maks} på 458 nm. I det hele taget kunne kvantemekanik sagtens forudsige absorptionsmaksimum. Modellerne var i stand til at give korrekte kvantitative forudsigelser, men de var ikke konklusivt ift. elektronens sandsynlighedstæthed ind i molekylet og der er uendelige mange potentialer som giver nogenlunde rigtige λ_{maks} . Modellen afhang også af ens definition af længde og begrænsning af parametre μ .

8. Litteraturliste

ARAKI, G.. & MURAI, T.. (1952, December). Molecular Structure and Absorption Spectra of Carotenoids (Progress of Theoretical Physics, Vol. 8, No.6). Oxford university press.
<https://doi.org/10.1143/PTP.8.639>

Autschbach, J.. (2007, November). Why the Particle-in-a-Box Model Works Well W for Cyanine Dyes but Not for Conjugated Polyenes. ACS publication. <https://doi.org/10.1021/ed084p1840>

Bayliss, N.S.. (1950). Conjugated Compounds. II. Simple Potential Energy Functions, Absorption Spectra, and Ionization in Linear Polyenes (Australian Journal of Scientific Research 3(1) 109 - 127). CSIRO Publishing. <https://doi.org/10.1071/CH9500109>

Enright, W.H.. (s.d.). CSCD37H - Analysis of Numerical Algorithms for Computational Mathematics: 3.8 The Eigenvalue Problem [Artikel]. University of Toronto.
<https://www.cs.toronto.edu/~enright/teaching/D37/CND37.pdf>

Fayed, Tarek A.. (s.d.). UV-Vis. Molecular Absorption Spectroscopy [powerpoint-præsentation]. Tanta University 2023. <https://sci.tanta.edu.eg/files/UV-Vis%20molecular%20absorption%20spectroscopy-%20BSc-Lect%205.pdf>

Finite Difference Method. (s.d.). Multiphysics Learning & Networking.
<http://www.multiphysics.us/FDM.html>, set sidst 11/04/2024

Griffiths, D. J.. (1994). Introduction to Quantum Mechanics. Cambridge University Press.

Grosman Michelsen, K.. & Thorkild Pedersen, D.. (2020). EN VERDEN AF FYSIK A. Gyldendal A/S.

Hill, E.. (s.d.). Setting up the discrete Schrödinger equation [Artikel]. University of Redlands.
https://facweb1.redlands.edu/fac/eric_hill/Phys341/Computation/Comp%20Setting%20up%20the%20discrete%20Schr%C3%B6dinger%20equation.pdf

HIRAYAMA, K. (1953, 16. July). Absorption Spectra and Chemical Structures. I. Conjugated Polyenes and p-Polyphenyls . ACS publications. <https://doi.org/10.1021/ja01607a041>

HIRAYAMA, K.. (1953). Absorption Spectra and Chemical Structures. I. Conjugated Polyenes and p-Polyphenyls. ACS Publications. <https://doi.org/10.1021/ja01607a041>

Hoff, U. B. . (s.d.). Kvantemekanik postulatene, notation, polarisationstilstande, entanglement, Bellstilstande [Artikel]. Quantum Lab. https://www.quantumlab.dk/wp-content/uploads/2018/11/QuantumLab_QMnotes2_UH.pdf

Karnjanawipagul, P., Nittayanuntawechee, W., Rojsanga, P. . & Suntornsuk, L. . (2010). Analysis of Beta-Carotene in Carrot by Spectrophotometry. Mahidol University Journal of Pharmaceutical Science. https://pharmacy.mahidol.ac.th/journal/_files/2010.08-16.pdf

Klymkowsky, M. W.. & Cooper , M. M.. (s.d.). Chapter 8: Conjugated compounds and aromaticity. Open Books. <https://openbooks.lib.msu.edu/oclue/chapter/chapter-8-conjugated-compounds-and-aromaticity/>

Kuhn, H.. (1949, December). A Quantum-Mechanical Theory of Light Absorption of Organic Dyes and Similar Compounds A Quantum-Mechanical Theory of Light Absorption of Organic Dyes and Similar Compounds (THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Vol. 17 Nr. 12). American Institute of Physics. <https://doi.org/10.1063/1.1747143>

Lecture 6 Particle in a Box and the Real World [Artikel]. (s.d.). Yuan-Chung Cheng's Research Group. https://quantum.ch.ntu.edu.tw/online_courses/PCIIQC2009/PDF/Lecture6.pdf

Nielsen, O. V.. & Axelsen, V.. (2011). BASISKEMI A. Haase & Søns forlag.

Polson, L.. (s.d.). Numerically Finding the Eigenstates/Energies of a 1D Quantum System. Luke Polson Physicsblog. <https://lukepolsonphysicsblog.wordpress.com/2020/10/29/example-post-3/>, set sidst 10/04/2024

Product Information: Beta-Carotene. (s.d.). Cayman Chemicals. <https://cdn.caymanchem.com/cdn/insert/16837.pdf>

Rasmussen, M. G.: (2016, 13. November). Matematisk modellering og numeriske metoder: 1. 3. Finite Difference-metoden [Artikel]. AAU Aalborg universitet.
https://people.math.aau.dk/~morteng/Homepage_files/E16MMNM/Lecture14.pdf

Sathish, , R.K. ., Sidharthan,, P.V. . & Udayanandan, K. M. . (s.d.). Particle in a Box -A Treasure Island for Undergraduates [Artikel]. Nehru Arts and Science Collage Kanhangad.
<https://www.nasc.ac.in/images/Publications/UdayanandanKM/2012-ParticleInABox-ATreasureIslandForUndergraduates.pdf>

Soderberg, T. . (s.d.). Molecular orbital theory- conjugation and aromaticity. LibreTexts Chemistry.
[https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Book%3A_Organic_Chemistry_with_a_Biological_Emphasis_v2.0_\(Soderberg\)/02%3A_Introduction_to_Organic_Structure_and_Bonding_II/2.03%3A_Molecular_orbital_theory-_conjugation_and_aromaticity](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Book%3A_Organic_Chemistry_with_a_Biological_Emphasis_v2.0_(Soderberg)/02%3A_Introduction_to_Organic_Structure_and_Bonding_II/2.03%3A_Molecular_orbital_theory-_conjugation_and_aromaticity)

Soderberg, T.. (s.d.). The Effect of Conjugation on λ_{max} . LibreTexts chemistry.
[https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Map%3A_Organic_Chemistry_\(Bruice\)/13%3A_Mass_Spectrometry_Infrared_Spectroscopy_and_Ultraviolet_Visible_Spectroscopy/13.19%3A_The_Effect_of_Conjugation_on_max](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Map%3A_Organic_Chemistry_(Bruice)/13%3A_Mass_Spectrometry_Infrared_Spectroscopy_and_Ultraviolet_Visible_Spectroscopy/13.19%3A_The_Effect_of_Conjugation_on_max)

Thomas, D.. (s.d.). Lecture XIII: Particle in a box. Georgetown university.
<https://bouman.chem.georgetown.edu/S02/lect13/lect13.htm>

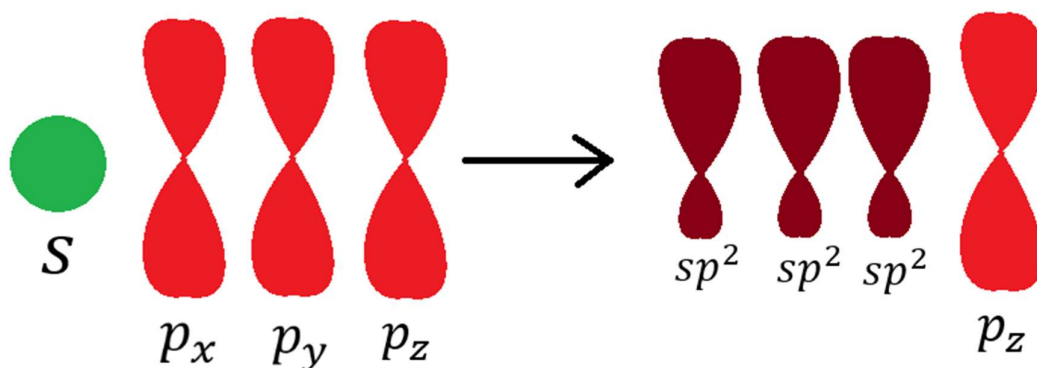
Zwiebach, B. . (s.d.). DIRAC's BRA AND KET NOTATION [Artikel]. Batista Lab.
<https://batistalab.com/classes/vaa/BraKets.pdf>

Forsides billeder:

- Absorption Spectra [Billede]. (2018). A Level Chemistry.
<https://alevelchemistry.co.uk/definition/absorption-of-light/>
- Potential fields [Billede]. (2023). SciTechdaily. <https://scitechdaily.com/time-bending-experiment-physicists-reveal-quantum-nature-of-light-in-a-new-dimension/>

9. Bilag

Bilag 1



Bilag 2

	name	Doublebonds	singlebonds	explambda[nm]	nHOMO	nLUMO	vinkel[pm]	DE[J]	bølgelængde[nm]
	Ethen+	1	0	174	1	2	249,41532	2,90541E-18	68,41781183
	Butadiene+	2	1	227	2	3	498,83063	1,21059E-18	164,2027484
	hexatriene+	3	2	275	3	4	748,24595	7,53256E-19	263,8972742
	octatetriene+	4	3	310	4	5	997,66127	5,44765E-19	364,8949964
	decapentadiene+	5	4	341	5	6	1247,0766	4,26127E-19	466,4850806
		6	5	380	6	7	1496,4919	3,49726E-19	568,394129
		7	6	396	7	8	1745,9072	2,96471E-19	670,4945559
	dihydro-b-carotene	8	7	421	8	9	1995,3225	2,5725E-19	772,7188159
	dihydro-a-carotene	9	8	443	9	10	2244,7378	2,27172E-19	875,0278039
	56dihydro-beta-carotene	10	9	448	10	11	2494,1532	2,03379E-19	977,3973118
	Beta-Carotene	11	10	458	11	12	2743,5685	1,8409E-19	1079,811552
	Dehydrocarotene	12	11	473	12	13	2992,9838	1,68137E-19	1182,259788
	Decapreno-e-carotene	13	12	494	13	14	3242,3991	1,54726E-19	1284,734467
	Decapreno-b-carotene	15	14	506	15	16	3741,2297	1,33434E-19	1489,742677
	Dodecapreno-b-carotene	19	18	536	19	20	4738,891	1,04627E-19	1899,910005

Bilag 3(Kode - programmeret i python)

```
import numpy as np

import matplotlib.pyplot as plt

from scipy.linalg import eigh_tridiagonal

import scipy.constants as scp
```

```
En = np.linspace(1, 15, 15)
```

```
hbarx = scp.hbar
```

```
m_e = scp.electron_mass
```

```
N = 3000
```

```
L = 2743e-3
```

```
dx = L/N
```

```
m = 510998
```

```
hbar = 197.326980
```

```
potk = (m)/(hbar**2)
```

```
#(5*(np.cos(np.pi*x))**2)
```

```
#1/2*(x-1/2)**2
```

```
#100*np.abs(x-1/2)
```

```
#1/2*2*10000*(x-1/2)**2
```

```
#1/2*m*4*(x-1/2)**2
```

```
#100*(-np.absolute(0.5-0.5*np.floor(3*x))+0.5)
```

```
#1000*np.exp(-(x-0.7)**2/(2*0.05**2))
```

```
#np.sin(3*np.pi*x/L)
```

```
#np.sin(3*np.pi*x/L)+1
```

```
#10*np.abs(1-np.floor(3*x/L)) endelig brønd
```

```
#np.abs(27/(np.tan(np.pi*x/L)))
```

```
#1*(-np.abs(np.sin(5*np.pi*x/L))+1)
```

```
#np.abs(0/(np.tan(np.pi*x/L)))+(np.sin(10*np.pi*x/L))**2
```

```
#(-np.abs(np.sin(np.pi*x/L))+1)-np.sin(10*x)
```

```
#np.abs(0.1/(np.tan(np.pi*x/L)))+2.4*np.cos(22*np.pi*x/L)+3
```

```

#np.abs(27/(np.tan(np.pi*x/L)))
#2.2*np.cos(22*np.pi*x/L)+3
#(5.2)*(-np.absolute(0.5-0.5*np.floor(3*x/L))+0.5)
#55*np.absolute(L/2-x)
#20*L/x
#11*L*x
#30*(np.absolute(L/2-x)-np.cos(43*np.pi*x/L))+30

def Theo(En):
    return ((En**2)*(hbarx**2)*np.pi**2)/(2*m_e*((L*1e-9))**2)
EnergyLevels = Theo(En)*(1/(1.602e-19))

def get_potential(x, dx):
    return 55*np.absolute(L/2-x)

def get_eigh_well():
    x = np.linspace(0, L, N)
    e = (-1/(dx**2) * np.ones(len(x)-3))
    d = (2/(dx**2) + 2*potk*(get_potential(x, dx)[1:-1]))
    return eigh_tridiagonal(d, e)

x = np.linspace(0, L, N)
w, v = get_eigh_well()

#plt.figure(dpi=1200)
# Normalize and plot Egenfunction

fig, ax1 = plt.subplots(figsize=(8, 8), dpi=1000)
ax2 = ax1.twinx()

for i in range(0, 10, 2):

```



```

v0 = (1 / np.sqrt(sum(v[:,i]**2)*dx)) * v[:,i]
v_p = v0**2
v_L = v_p+(w[i]/(2*potk))
labl = '$\psi_{\{\{2d\}\}}$'.format(i+1)
ax1.plot(x[1:-1], v_L, label=labl)

for i in range(10, 12):
    v0 = (1 / np.sqrt(sum(v[:,i]**2)*dx)) * v[:,i]
    v_p = v0**2
    v_L = v_p+(w[i]/(2*potk))
    labl = '$\psi_{\{\{2d\}\}}$'.format(i+1)
    ax1.plot(x[1:-1], v_L, label=labl)

Energilevels = (w[0:15]/(2*potk))
print(Energilevels)
print((((6.626e-34*3e8)/((Energilevels[11]-Energilevels[10])*(1.602e-19))))*1e9)

# Plot
ax2.plot(x, get_potential(x, dx), color='k', label='V(x)')
ax2.legend(bbox_to_anchor=(1.14, 0.09))
ax1.legend(bbox_to_anchor=(1, 1.05), loc='upper right', ncol=10)
ax1.set_xlabel('x[nm]', fontsize=20)
ax2.set_ylabel('$V[eV]$', fontsize=20)
ax1.set_ylabel('$E_n[eV] + |\psi_n|^2$', fontsize=20)
ax2.set_ylim(0, 400)
ax1.set_ylim(-1)
ax1.set_xlim(0, L)
ax2.set_xlim(0, L)

plt.figure(figsize=(2,4), dpi=500)

```

```

plt.eventplot(positions=[EnergyLevels,Energilevels], orientation='vertical', colors='r', linewidths=1,
linelengths=0.95)

plt.ylabel('$E_n[eV]$')

#plt.xlabel('$Energieniveau$')

plt.xlim((-1,2))

plt.xticks(ticks=[-1, 0, 1, 2],labels=["", '$V=0$', 'simul', ''])

ax = plt.gca()

plt.show()

```