MECANIQUE QUANTIQUE

LA COULEUR DES CYANINES

1. La longueur de la portion

En prenant en compte la succession des atomes on a :

$$L = d_{C-N} + 4$$
. $d_{C-C} + 4$. $d_{C-C} + d_{C-N} = 1,359 \text{ nm}$

2. Le nombre d'électrons π

Cela correspond aux électrons des deuxièmes liaisons, elles sont au nombre de cinq, il y a donc : 10 électrons π

3. La longueur d'onde accessible aux électrons

Les électrons sont des éléments quantiques, leur comportement est décrit comme une fonction d'onde. Dans la molécule étudiée, ils se retrouvent piéger entre les deux atomes d'azotes, comme confiner dans un puits de potentiel à une dimension de longueur L.

Par analogie avec la corde vibrantes, les longueurs d'onde accessibles aux électrons sont données par :

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}$$
 avec n entier naturel

4. La quantité de mouvement

La quantité de mouvement des électrons est donnée par la relation de Louis De Broglie : $p = h/\lambda$.

On obtient donc :
$$p_n = \frac{nh}{2L}$$

5. Les énergies accessibles

L'énergie des électrons correspond à de l'énergie cinétique : $E = \frac{p^2}{2m}$ En remplaçant la quantité de mouvement par le résultat trouvé : $E = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}$

6. Les niveaux d'énergie

$$n = 1$$
 $E_1 = 0,204 \text{ eV}$

$$n = 4$$
 $E_4 = 3,30 \text{ eV}$

$$n = 7$$
 $E_7 = 10,0$ eV

$$n = 2$$
 $E_2 = 0.817 \text{ eV}$ $n = 3$ $E_3 = 1.84 \text{ eV}$ $n = 5$ $E_5 = 5.11 \text{ eV}$ $n = 6$ $E_6 = 7.36 \text{ eV}$

$$n = 3$$
 $E_3 = 1.84 \text{ eV}$

$$n = 5$$
 $E_5 = 5.11 \text{ eV}$

$$n = 6$$
 $E_6 = 7.36$ e

7. Longueur d'onde $\lambda_{5,6}$

Par conservation de l'énergie, l'énergie du photon correspond la la transition électronique :

$$hv = \Delta E \Rightarrow \frac{hc}{\lambda_{5.0}} = E_6 - E_5$$

$$h_{V} = \Delta E \Rightarrow \frac{hc}{\lambda_{5,6}} = E_{6} - E_{5}$$

$$D'où \lambda_{5,6} = \frac{hc}{E_{6} - E_{5}} = 553 \text{ nm}$$

Cela correspond à la limite vert/jaune

8. La couleur du cyanine

Le cyanine apparait donc rouge/violet