

## Dipolmomente einiger Phthalimid-Derivate im ersten angeregten Singulettzustand

Von L. BILOT und A. KAWSKI

Physikalischs Institut der Pädagogischen Hochschule,  
Gdańsk, Polen \*

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

Auf Grund der früher von uns<sup>1, 2</sup> 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-Acetylaminophthalimid (IV)

bestimmt.

Der Vergleich der erhaltenen Gleichungen<sup>2, 3</sup> 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

$$m_1 = \frac{2(\mathbf{M}_e - \mathbf{M}_g)^2}{h c a^3}, \quad (1)$$

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

wobei  $\mathbf{M}_g$  und  $\mathbf{M}_e$  die elektrischen Moleküldipolmomente im Grund- und Anregungszustand,  $a$  den Onsager-Molekülradius,  $h$  die PLANCKSche Konstante und  $c$  die Vakuumlichtgeschwindigkeit bedeuten.

Für das Dipolmoment im ersten angeregten Singulettzustand  $M_e$  und den Winkel  $\varphi$  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  $180^\circ$  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 Onsager-Radius  $a$  und die Polarisierbarkeit  $\alpha$  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 sind<sup>4</sup>, konnten aus den Neigungen der Geraden die  $m_1$ - und  $m_2$ -Werte für diese Phthalimid-Derivate genau bestimmt werden<sup>3</sup>. In Tab. 1 sind die  $\alpha/a^3$ ,  $m_1$ - und  $m_2$ -Werte zusammengestellt.

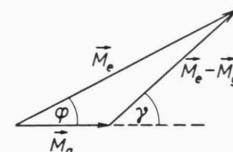


Abb. 1.

Die Dipolmomente im Grundzustand für die oben erwähnten Phthalimid-Derivate (I) bis (IV) wurden kürzlich von BACHSCHIEW<sup>5</sup> 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  $\varphi$  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 BACHSCHIEW<sup>5</sup> berechneten.

Substanz	$a$ Å	$\frac{\alpha}{a^3}$	$m_1$		$m_2$		$M_g$ berech. Gl. (3)	$M_e$ Gl. (3)	$\varphi$ Gl. (4)	$\gamma$	$ \mathbf{M}_e - \mathbf{M}_g $	$M_g$ Gl. (5)
			in $\text{cm}^{-1}$		in Debye							
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.

<sup>1</sup> L. BILOT u. A. KAWSKI, Acta Phys. Polon. 22, 289 [1962].

<sup>2</sup> L. BILOT u. A. KAWSKI, Z. Naturforschg. 17 a, 621 [1962].

<sup>3</sup> L. BILOT u. A. KAWSKI, Z. Naturforschg. 18 a, 10 [1963].

<sup>4</sup> N. G. BACHSCHIEW, Opt. i Spektr. 6, 646 [1958].

<sup>5</sup> N. G. BACHSCHIEW, Opt. i Spektr. 13, 192 [1962].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.