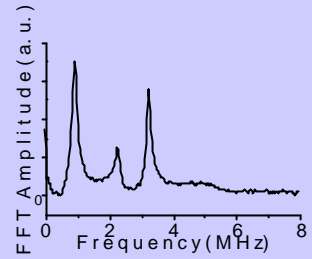


## PC IV: Theorie der Chemischen Bindung & Molekülspektroskopie



SS 2002, Di:10-12, Fr:11-12, HS II

Übungen :

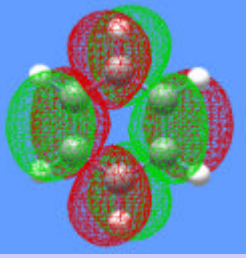
(Übungsaufgaben Ausgabe/Rückgabe: Di in der Vorles.)

Klausur:

(50% der Punkte, 10% Bonus bei 60% Übungsaufgaben)

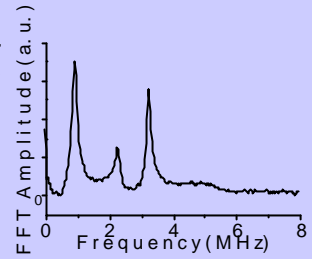
Zusammenfassungen/Übungsaufgaben:

prisner@prisner.de



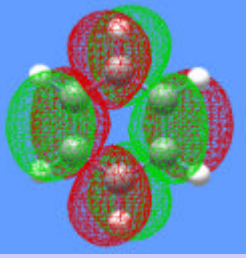
## PC IV: Chemische Bindung

### Voraussetzungen



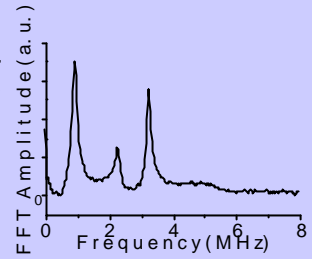
Voraussetzungen :

- Quantentheorie von PCII (Atome)
  - *Wellenfunktion  $\Psi$ ,*
  - *Hamiltonoperator  $H$*
  - *Schrödinger Gleichung*
  - *Eigenwerte, Eigenfunktionen*
  - *elektronische Orbitale des H-Atoms*
  - *Hybridorbitale*
  - *Variationsprinzip*
  - *Pauliverbot*



## PC IV: Chemische Bindung

### Literatur



### Literatur:

Haken/Wolf: *Molekülphysik und Quantentheorie*, Springer

Försterling/Kuhn: *Moleküle & Molekülanhäufungen*, Springer

### QT der chemischen Bindung:

Reinhold: *Quantentheorie der Moleküle*, Teubner

### Molekülspektroskopie:

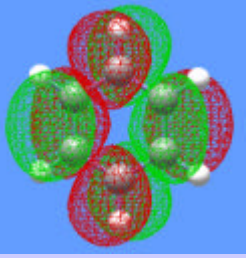
Banwell/McCash: *Molekülspektroskopie* Oldenburg

### Allgemein:

Atkins: *Physikalische Chemie*, VCH

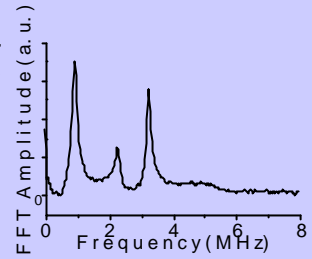
Wedler: *Lehrbuch der Physikalischen Chemie*, VCH

Silbey: *Physical Chemistry*, Wiley



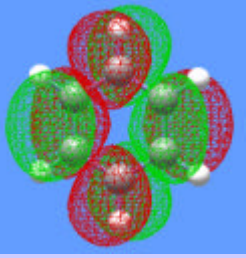
## PC IV: Chemische Bindung

### Topics



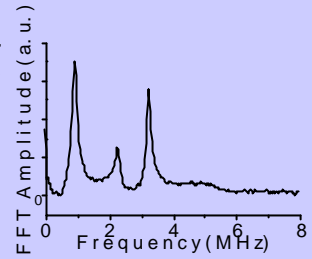
### Inhaltsangabe/Topics:

- Physikalische Eigenschaften & Messung
  - Masse, Größe, elektrische & magnetische Eigenschaften
- Intramolekulare Wechselwirkungen
  - vanderWaals-Wechselwirkungen
- Chemische Bindung
  - 2-Atomige Moleküle
  - $\pi$ -Elektronensysteme
  - Koordinationsverbindungen
  - MO-Theorie



## PC IV: Chemische Bindung

### Inhaltsangabe 1



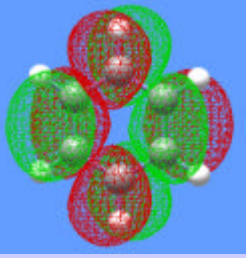
### Inhaltsangabe:

- **Physikalische Eigenschaften & Messung**

- Masse: Massenspektrometrie
- Größe: Streuexperimente, Rotationspektrometrie
- elektrische Eigenschaften: elektr. Dipolmoment  $\epsilon$ ,  
Polarisation, Wechselwirkung mit E-Feldern
- magnetische Eigenschaften: magn. Dipolmoment  $\mu$ ,  
Dia/ Paramagnetismus, Wechselwirkung mit B-Feldern

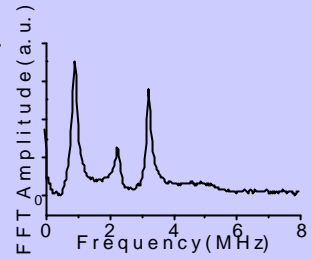
- Intermolekulare Wechselwirkungen

- vanderWaals-Wechselwirkungen
  - *Lenard-Jones Potentiale*
  - *Mechanismen*



## PC IV: Chemische Bindung

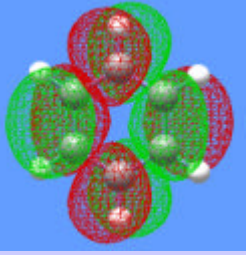
### Inhaltsangabe 2



### Inhaltsangabe im Detail:

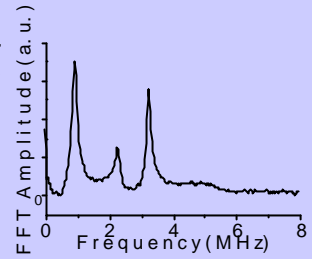
- **Chemische Bindung**

- 2-Atomige Moleküle
  - *Coulomb-Potential*
  - *Schwingungsspektroskopie*
  - *LCAO-MO Methode*
- $\pi$ -Elektronensysteme
  - *Aromatische Kohlenwasserstoffe*
  - *Hückel MO Methode*
  - *Alternierende Kohlenwasserstoffe*
  - *Freies Elektronengas Methode*
  - *Optische Spektroskopie*
  - *Fluoreszens, Phosphoreszenz*
  - *Raman-Schwingungsspektroskopie*
  - *Normalmoden*



## PC IV: Chemische Bindung

### Inhaltsangabe 3



### Inhaltsangabe:

- Koordinationsverbindungen
  - *Ligandenfeldtheorie*
  - *Spinzustände*
  - *Elektronische Anregungen*
  - *Franck-Condon Prinzip*
  - *Auswahlregeln für EM-Anregungen*
  - *Symmetriegruppen*
- MO-Theorie
  - *Antisymmetrie, Slater-Determinante*
  - *Hartree-Fock Formalismus*