

Vorlesung PCIII Lehramt SS 2013

Vorlesung Donnerstag 10:00-12:00 H2

(Ausfalltermine siehe Webseite www.prisner.de unter Teaching)

N140 Raum 16 / Sekretariat Raum 17

Übungsgruppe

Dr. Sarah Römer (N120 Raum 218)

Dienstag 10-11 Uhr N140 Seminarraum 207

Übungsblatt Ausgabe/Rückgabe in Übungsgruppe und auf obiger Webseite
1 Woche für Bearbeitung, 1 Woche für Korrektur

Leistungsnachweis:

Klausur 26.7.2013 Hörsaal H2

1Blatt DinA4 handgeschrieben + Taschenrechner

10% Bonus bei 60% der Übungsaufgaben-Punkte

Skript

Altes Skript und jeweils nach Vorlesung neues Skript auf Webseite

Literatur:

Allgemeine Lehrbücher der Physikalischen Chemie

Atkins Physikalische Chemie VCH

Engel/Ried Physikalische Chemie Pearson

Quantentheoretische Grundlagen

Ratner/Schatz Quantum Mechanics in Chemistry Prentice Hall

Atkins/Friedman Molecular Quantum Mechanics Oxford

McQuarrie Quantum Chemistry University Science Books

Spektroskopische Grundlagen

Banwell/McCash Molekülspektroskopie Oldenburg Verlag

Schäfer/Schmidt Methods in Physical Chemistry Wiley-VCH

Haken/Wolf Molekülphysik und Quantenchemie Springer

Inhaltsangabe der Vorlesung

1. Einführung / Historisches
2. Grundlagen der Quantenmechanik
3. Molekulare Spektroskopie-Methoden
 - a. Vibrations-Spektroskopie
 - b. Rotations-Spektroskopie
 - c. Optische Spektroskopie
 - d. Magnetische Resonanz
4. Zusammenfassung

Für jede der Methoden ist der Aufbau folgendermaßen:

- Experimenteller Aufbau
- Einfache Beispiele von Molekülspektren
- Quantenmechanische Grundlagen
- Erläuterung von Spezialfällen / Ausnahmen
- Moderne Anwendungen
- Kurze Zusammenfassung der wesentlichen Punkte

Einführung in die molekulare Spektroskopie

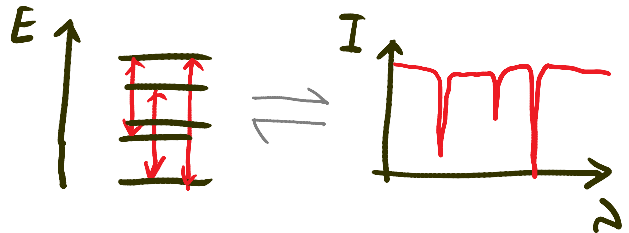


Joseph Fraunhofer (1787-1826)
Optisches Institut in Benediktbeuern



Discrete Absorptions-Linien im Sonnenlicht-Spektrum!

Ursache sind diskrete E-Zustände von Molekülen



Robert Bunsen (1811-1899)
Göttingen, Kassel, Marburg,
Breslau, Heidelberg

Entdeckung der Alkalimetalle
Cäsium und Rubidium im
Dürkheimer Mineralwasser



Gustav Kirchhoff (1824-1887)
Königsberg, Breslau,
Heidelberg, Berlin

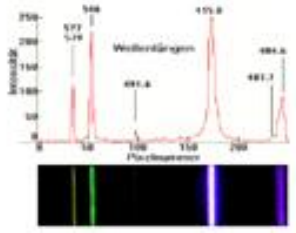


Um Spektren aufzunehmen,
muss Licht unterschiedlicher
Wellenlängen getrennt detektiert
werden



Lampe Probenzelle Prisma Detektor

Das Frequenzdispersierende Element
(hier Prisma) kann auch vor der
Probenzelle eingesetzt werden



Quecksilber
Emissions-Spektrum

Zwei Statements von Wissenschaftlern zu spektroskopischen Methoden



Albert Michelson (1852-1931)
Universität Chicago



Michelson Interferometer

Michelson, Light Waves and their uses (1903)
Die wichtigsten Grundgesetze und Grundtatsachen
der Physik sind alle schon entdeckt;
unsere zukünftigen Entdeckungen müssen wir
in der 6. Dezimalstelle suchen.



Sir Humphrey Davy (1778-1829)
Royal Institution London



Fig. 192. Zwei Gaszylinder

Sir Humphrey Davy, Elements of Chemical Philosophy (1820)
Nichts trägt mehr zum Fortschritt der
Wissenschaft bei als die Anwenden jener
neuen Technik

Klassifizierung der Frequenz-Bereiche und Methoden

| $\log \nu [s^{-1}]$ | $\lambda [m]$ | Bereich | Mol. Prozesse | Methode |
|---------------------|---------------|------------|------------------------------------|--------------------|
| 8 | 3 m | RF (4) | Kern-Spin Aufspaltung im B-Feld | NMR |
| 10 | 3 cm | MW (2) | Rotation Elektronen-Spin | MW-Spekt. EPR |
| 13 | 30 μ m | IR (1) | Vibration | IR-Spekt. |
| 15 | 300 nm | (3) UV-VIS | e^- -Anregung | UV-VIS |
| 18 | 0.3 nm | X | innere e^- von größ. Atomen | Röntgen- |
| 20 | 3 pm | γ | Kernzustände | Massen- spektr. |

T: 300K
↓
E

○ Reihenfolge
der
Behandlung in
der Vorlesung

E-Einheiten: [J], $\frac{kJ}{mol}$

molekular: $1 eV = \frac{1.6 \cdot 10^{-19} C}{9e} \cdot V = 1.6 \cdot 10^{-19} J = 96 \frac{kJ}{mol}$

Thermische Energie (300K) = $E_T = k_B \cdot T = 26 meV$

Umrechnen von E, λ, ν für Licht (elektromagnetische Wellen)

de Broglie Beziehung aus der Quantenmechanik:

$E = h \cdot \nu$

E : Energie [J]
 ν : Frequenz [s^{-1}]

h : Planck'sches Wirkungsquantum
 $= 6,6 \cdot 10^{-34} Js$

klassische Beziehung der Optik:

$c = \lambda \cdot \nu$

ν : Frequenz [s^{-1}]
 λ : Wellenlänge [m]

$c = 3 \cdot 10^8 \frac{m}{s}$ = Lichtgeschwindigkeit

Weitere oft verwendete Größe: Wellenzahl $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$
Einheit [cm^{-1}]