

Fortgeschrittene Physikalische Chemie (PCIII) – B. Tieke

Inhaltsangabe und Unterlagen zu Vorlesung und Seminar im SS 2010

1 H-Atom und Mehrelektronenatome: Aufbau und Spektren

1.1 Modell

1.2 Schrödinger-Gleichung

1.3 Wellenfunktion und Energie

1.4 Quantenzahlen und Orbitale

1.5 Linienspektren

1.6 Spektroskopische Übergänge und Auswahlregeln

1.7 Mehrelektronenatome

1.7.1 He-Atom

1.7.2 Spektren von Mehrelektronenatomen

1.7.2.1 Singulett- und Triplettzustände

1.7.2.2. Atomspektrum Helium

1.7.3 Spin-Bahn-Wechselwirkung

1.7.3.1 Gesamtdrehimpuls j

1.7.3.2 Feinstruktur von Emissionsspektren

1.7.4 Termsymbole und Auswahlregeln

1.7.4.1 Gesamtbahndrehimpuls

1.7.4.2 Gesamtspindrehimpuls und Spinmultiplizität

1.7.4.3 Gesamtdrehimpuls und Russel-Saunders-Kopplung

1.7.4.4 Einfluss von Magnetfeldern

1.7.4.5 Zeeman-Effekt

2 Spektroskopie I (Allgemeines, Rotations- und Schwingungsspektroskopie)

2.1 Allgemeine Aspekte

2.1.1 Spektrometer

2.1.2 Lambert-Beersches Gesetz

2.1.3 Integraler Absorptionskoeffizient

2.1.4 Bandenintensität

2.1.5 Linienverbreitung

- 2.2 Rotationsspektroskopie
 - 2.2.1 Trägheitsmoment des Moleküls
 - 2.2.2 Rotationsenergieniveaus
 - 2.2.3 Rotationsübergänge und –spektren
 - 2.2.4 Raman-Rotationsspektroskopie
- 2.3 Schwingungsspektroskopie
 - 2.3.1 Schwingungen zweiatomiger Moleküle
 - 2.3.2 Anharmonizität
 - 2.3.3 Schwingungen mehratomiger Moleküle
 - 2.3.4 Schwingungsspektren mehratomiger Moleküle
- 2.4 Rotationsschwingungsspektroskopie
- 2.5 Raman-Schwingungsspektroskopie
- 2.6 Raman-Rotationsschwingungsspektroskopie

3 Symmetrie von Molekülen

- 3.1 Symmetrioperationen und -elemente
- 3.2 Klassifizierung von Molekülsymmetrien in Punktgruppen
 - 3.2.1 Gruppen C_1 , C_i , C_s
 - 3.2.2 Gruppen C_n , C_{nv} , C_{nh}
 - 3.2.3 Gruppen D_n , D_{nh} , D_{nd}
 - 3.2.4 Gruppen S_n
 - 3.2.5 Sonstige Gruppen
- 3.3 Konsequenzen der Molekülsymmetrie
- 3.4 Chiralität
- 3.5 Hermann-Mougin-System

4 Spektroskopie II (UV/Fluoreszenzspektroskopie, XPS)

- 4.1 Elektronische Übergänge
- 4.2 Franck-Condon-Prinzip
- 4.3 Franck-Condon-Faktor des Übergangs
- 4.4 Beispiele für elektronische Übergänge
- 4.5 Fluoreszenz und Phosphoreszenz
- 4.6 Laser
 - 4.6.1 Funktionsweise

- 4.6.2 Inversion der Besetzungszahlen
- 4.6.3 Resonator
- 4.6.4 Charakteristik der Laserstrahlung
- 4.6.5 Laserbauarten
- 4.7 Photoelektronenspektroskopie
 - 4.7.1 Prinzip
 - 4.7.2 UPS
 - 4.7.3 XPS (ESCA)

5 Spektroskopie III (NMR und ESR)

- 5.1 Prinzip
- 5.2 Informationen aus NMR-Spektren
 - 5.2.1 Chemische Verschiebung
 - 5.2.2 Feinstruktur
 - 5.2.3 Energieniveaus gekoppelter Systeme
 - 5.2.4 Linienbreiten von NMR-Signalen und Geschwindigkeit von Prozessen
- 5.3 Elektronenspinresonanz

6 Elektrische und magnetische Eigenschaften von Molekülen

- 6.1 Elektrische Eigenschaften
 - 6.1.1 Messung von Dipolmomenten
 - 6.1.2 Brechungsindex und Molrefraktion
 - 6.1.3 Polarisierbarkeit bei hoher Frequenz
 - 6.1.4 Optische Aktivität
- 6.2 Magnetische Eigenschaften

Die Vorlesung orientiert sich an:

- 1.) P.W. Atkins, 'Physical Chemistry', 6th Edition, Oxford University Press 1998.
- 2.) P. W. Atkins, J. de Paula, Physikalische Chemie, 4. Auflage, Wiley-VCH, Weinheim 2006
- 3.) G. Wedler, Lehrbuch der Physikalischen Chemie, 5. Auflage, Wiley-VCH, Weinheim 2004
- 4.) Th. Engel, Ph. Reid, 'Physikalische Chemie', Pearson Studium, München 2006.