

MODUL „EINLEITUNG IN DIE SPEKTROSKOPIE“

*Prof. Jörg Matysik
4. Semester BSc*

Aufbau der Vorlesung

1. EINLEITUNG

- 1.1 Eigenschaften von elektro-magnetischer Strahlung
Frequenz, Polarisierung, Intensität
- 1.2 Kopplung von Strahlung und Materie
Absorption (elektr. Dipolübergänge, Kirchhoff, Stefan-Boltzmann, Wien, Rayleigh-Jeans, Planck, Einstein), Streuung (Rayleigh, Mie, Raman), Brechung (Snell) und Reflexion, Beugung.
- 1.3 Linienweite und Linienform
(HWHH, Lorentz, Gauss, Voigt)

2. ELEKTRONISCHE ÜBERGÄNGE

- 2.1 Praxis
Spektrometer, Lambert-Beer, Farbstofftheorie (Witt)
- 2.2 Typen von elektronischen Übergängen
Nomenklatur, π - π^* (Elektronengas, Hückel, linear und zyklisch), n - π^* , Chromophore, d-d, u.a.
- 2.3 Photophysik
Franck-Condon, Auswahlregeln, Chiroptische Methoden (Polarimetrie, ORD und CD, Fluoreszenz, Phosphoreszenz)

3. ROTATIONS- UND SCHWINGUNGSSPEKTROSKOPIE

- 3.1 Molekulare Energieverteilung
- 3.2 Reine Rotationsspektren
- 3.3 IR-Spektren (Kraftkonstante, Intensitäten, typische Spektren)
- 3.4 Raman-Spektroskopie
- 3.5 Spektrometer
- 3.6 Vergleich IR zu Raman
- 3.7 Poly-atomare Moleküle
Normalschwingungen, typische Gruppenschwingungen

4. EPR-SPEKTROSKOPIE

- 4.1 Elektrische und magnetische Übergänge
Zeeman (elektrisch und magnetisch), Bahn und Spin, Wechselwirkung Spin-Orbital
- 4.2 EPR-Spektroskopie
- 4.3 Das EPR-Spektrum
g-Werte, Hyperfein-Wechselwirkung

5. NMR-Spektroskopie

5.1 Einführung

5.2 Puls-Experiment

5.3 Das NMR-Spektrum

Chemische Verschiebung, J-Kopplung

5.4 Relaxation

5.5. Dynamik

5.6 Methoden

Zwei-dimensionale NMR, Festkörper-NMR

6. ALLES

Zusammenschau der unterschiedlichen Methoden zur kombinierten
Spektreninterpretation

7. MASSEN-SPEKTROMETRIE

(bei Prof. Hoffmann parallel gelesen)