

| Symmetrie                                                                                                                                                                                         |  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                                 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Benötigt</b><br><b>Voraussetzungen</b><br><b>aus anderen Lehr-</b><br><b>veranstaltungen :</b><br>Mathematikkenntnisse<br>über Gruppen,<br>Grundlagen in<br>Quantenchemie und<br>Spektroskopie |  | <b>Konzepte</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Einfluss Symmetrieelemente auf Molekül, Symmetrieüberlegungen anwendbar, da Vertauschungsrelation mit Hamiltonoperator.</li> <li>• Mögliche Symmetrieelemente für Moleküle und mathematische Durchführung</li> <li>• Produkte von Symmetrieelementen, Begriff der Gruppe und Klassen, Anwendung auf Symmetrieeoperationen, Punkt-, Symmetriegruppen, Schönflies Symbole, welche Gruppen existieren</li> <li>• Bestimmung der Punktgruppe eines Moleküls (Schema)</li> <li>• Punktgruppen, Darstellung der Gruppen, Multiplikationstabellen, reduzible und irreduzible Darstellungen einer Gruppe, Eigenschaften von Darstellungen</li> <li>• Charaktertafeln, Bedeutung, Inhalt, Diskussion Mulliken-Symbole</li> <li>• Projektionsoperatoren zur Erzeugung der symmetrieadaptierten Wellenfunktionen</li> <li>• Beispiele:             <ul style="list-style-type: none"> <li>o Aufbau symmetrieadaptierte Molekülorbitale (Mos), Vergleich zu lokalisierten Molekülorbitalen (z.B. <math>sp^3</math>-Hybridisierung vs. symmetrieadaptierter MOs für Methan), Diskussion an Hand von Photoelektronenspektroskopie</li> <li>o Symmetrie als Grundlage der Auswahlregeln in der Spektroskopie: mathematische Grundlage, Schwingungen (Normalmoden), IR-/Raman-Auswahlregeln, UV/Vis-Auswahlregeln</li> </ul> </li> <li>• Anwendung Symmetrie auf Kristallstrukturen</li> </ul> | <b>Voraussetzung für</b><br><b>nachfolgende</b><br><b>Spezialgebiete:</b><br>Spektroskopie,<br>Quantenchemie,<br>MO- und<br>Ligandenfeldtheorie |

| Kinetik und Transportphänomene                                                                                                                     |  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                           |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------|
| <b>Benötigt</b><br><b>Voraussetzungen</b><br><b>aus anderen Lehr-</b><br><b>veranstaltungen :</b><br>Gute<br>Mathematikkenntnisse<br>Thermodynamik |  | <b>Konzepte</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Transportphänomene</i>: Allgemeine Transportgleichung, Diffusion, Viskosität, Wärmeleitung, Ionentransport in Elektrolytlösungen.</li> <li>• <i>Leitfähigkeit</i> (evtl. Abstimmung mit Vorlesung Elektrochemie): Äquivalentleitfähigkeit, Kohlrausch-Gesetze, Ostwaldsches Verdünnungsgesetz, starke/schwache Elektrolyte, Waldensche Regel, Überföhrungszahl, Ionenstärke, Relaxations- und elektrophoretischer Effekt, Debye-Hückel-Theorie</li> <li>• <i>Grundgedanken zur chemischen Kinetik</i>: Bedeutung der Reaktionskoordinate, Zusammenhänge Reaktionskoordinaten, Mechanismus und Umsatz, Zusammenhang mit Thermodynamik und statistischer Thermodynamik (falls aufgrund zeitlicher Reihenfolge der Vorlesungen möglich), parallele und konsekutive Reaktionen</li> <li>• Grundlagen der Gaskinetik, Geschwindigkeitsverteilungen, Stosszahl und mittlere freie Weglänge, Effusion, Stosstheorie</li> <li>• Unterschiede von Reaktionen in Gasen und Flüssigkeiten, Diffusion, langsame und diffusionskontrollierte Reaktionen, thermodynamisch/kinetisch kontrolliert, Übergangszustand</li> <li>• <i>Formale Kinetik</i>: Zeitgesetze (Differentialgleichung), Elementarreaktionen, Molekularität, Reaktionsordnung, lineare Abhängigkeiten von Teilschritten</li> <li>• <i>Beispiele für verschiedene Reaktionsordnungen</i>: Einfache Reaktionen, Gleichgewichtsreaktionen, Folgereaktionen, Enzymkinetik (Michaelis-Menten), Katalyse</li> <li>• <i>Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit</i>: Arrhenius, Lewis und Eyring, Betrachtung über statistische Thermodynamik (falls aufgrund zeitlicher Reihenfolge der Vorlesungen möglich)</li> <li>• <i>Energetik</i>, Potentialhyperfläche, Übergangszustand, Beschreibung durch Molecular Dynamics (MD), kinetische Isotopieeffekte, Elektronentransferprozesse, Marcustheorie</li> </ul> | <b>Voraussetzung für</b><br><b>nachfolgende</b><br><b>Spezialgebiete:</b> |

|  |  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |  |  |
|--|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|
|  |  | <ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Spezielle Reaktionen</i>: Photoreaktionen, Explosion (-Grenzen), Kettenreaktionen (radikalisch, etc.), Knallgas, Katalyse</li> <li>• <i>Methoden zur Beobachtung von Reaktionen</i>: Spektroskopie, Stop-Flow, T-Jump, Molekularstrahlen, Blitzlichtphotolyse, Relaxationsmethode</li> <li>• <i>Auswertung</i>: Swinebourne, Guggenheim</li> <li>• <i>Elektrodenkinetik</i> (evtl. Abstimmung mit Vorlesung Elektrochemie) : Starre und diffuse Doppelschichten, Doppelschichtkapazität, Durchtritts- und Diffusionsüberspannung, Polarographie</li> <li>• <i>Biochemische Reaktion</i>: Affinitätsreaktionen</li> <li>• <i>Kinetik im Flusssystem</i>: Nicht-Batch-Prozesse, Pharmakodynamik, Kompartimentmodell</li> </ul> |  |  |
|--|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|

## 12 Grundlagen der Molekülspektroskopie

|                                                                                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                                                            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p><b>Benötigt</b><br/> <b>Voraussetzungen</b><br/> <b>aus anderen Lehr-</b><br/> <b>veranstaltungen :</b><br/>         Gute<br/>         Mathematikkenntnisse,<br/>         Quantentheorie</p> | <p><b>Konzepte</b><br/> <i>Elektromagnetische Strahlung:</i> Welle, Teilchen, Dualismus, Strahlungsausbreitung, Nahfeld/Fernfeld, Entstehung von Strahlung, Kohärenz, Interferenz, Spektralbereiche, Wellengleichung, Quantelung, Phase und Polarisierte Strahlung<br/> <i>Beschreibung von Materie im Rahmen der Quantenmechanik (Abstimmung mit Quantenchemie notwendig):</i> zeitunabhängige und –abhängige Schrödingergleichung, Hamiltonoperator, Eigenwertgleichung, Wellenfunktion, Energiezustände, relative Besetzungen, Elektronendichteverteilungen, Orbitale, Bezeichnungen, Quantenzahlen, verbotene und erlaubte Übergänge<br/> <i>Wechselwirkung Strahlung Materie:</i> Materie im elektrischen Feld, Dielektikum, Vergleich mit Kondensator, Polarisierung, Streuung, Absorption, Brechung, Reflexion (diffus, gerichtet), Oszillatortheorie mit Dämpfung, Imaginärteil bzw. Phasenabhängigkeit, Phasengeschwindigkeit, Gruppengeschwindigkeit, Lambert-Beersches-Gesetz<br/> <i>Jablonski-Termschema:</i> Strahlungslose Desaktivierung, Internal-Conversion, Intersystem-Crossing, Singulett, Triplett, Übergangswahrscheinlichkeiten, Lebensdauern der Zustände<br/> <i>Teilchen im Kasten:</i> Translationsenergie im Vergleich zu Elektron im Molekül, Energie für Teilchen im Kasten, Nullpunktsenergie, mehrdimensionaler Kasten, Kuhnsches Elektronengasmodell, Plattssches Perimetermodell, Tunneleffekt<br/> <i>Oszillator:</i> Lösung der Schrödingergleichung mit harmonischen bzw. anharmonischen Potenzial, reduzierte Masse, Polynome, Energieeigenwerte, Obertöne, Auswahlregeln, Symmetrie, Nullpunktsenergie, Hermiteische Polynome, Normalschwingungen, Bohrsches Korrespondenzprinzip<br/> <i>Starrer Rotator:</i> Eigenwert aus Schrödingergleichung, Entartung, Präzedieren, Besetzung<br/> <i>Vergleich harmonischer Oszillator/starrer Rotator:</i> Spektren, Termschema, Spektrum mit PQR-Zweig,<br/> <i>Ramanspektroskopie:</i> Streuvorgang, virtuelle Energieniveaus, Stokes, anti-Stokes</p> | <p><b>Voraussetzung für</b><br/> <b>nachfolgende</b><br/> <b>Spezialgebiete:</b><br/>         Analytik, AC, OC,<br/>         Symmetrie</p> |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

|  |  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |  |  |
|--|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|
|  |  | <p><i>Übergänge:</i> Born-Oppenheimer-Näherung, Franck-Condonprinzip, Linienbreiten</p> <p><i>NMR-Spektroskopie:</i> Dauerstrich, gepulst, Sättigung, Relaxation, Gleichverteilung, Spin-Gitter und Spin-Spin-Relaxation mit Lebensdauern</p> <p><i>ESR-Spektroskopie</i></p> <p><i>Spektrometer:</i> Schematische Anordnung für alle Spektralbereiche</p> <p><i>Ergänzungen:</i> Reflexion, Totalreflexion, geführte Strahlung, Evaneszenztes Feld, Mößbauer, Oberflächenspektroskopie, Michelson, Fouriertransformation</p> <p><b>Übungen:</b></p> <p><b>Seminar:</b></p> |  |  |
|--|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|