

1. Arbeitsblatt zur
Molekülspektroskopie



Ok. Nottewitz

24. 2. 17



Karlsruher Institut für Technologie
Institut Physikalische Chemie

Praktikum:

testiert am:

Betreuer:

* Diese Gleichsetzung ist nicht zulässig, denn

$$E_{1,m} = E_1 \cdot N_A$$

↑ ↑
molar auf ein Teilchen bezogen

1. Arbeitsblatt Molekülspektroskopie

Gruppe 47 20.2.17

Kilian Anna-Lena
Della Maximilian

- Aufg. 1:
- Charakterisierung molekularer Eigenschaften wie Bindungslängen & -stärken, Kraftkonstanten, Struktur etc.
 - Identifizierung von Stoffen durch charakteristische Spektren (qualitative Analytik)
 - Quantitative Analytik

- Aufg. 2:
1. Quantisierung der Photonenenergie $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$
 2. Welle-Teilchen-Dualismus (de Broglie-Wellenlänge)

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

3. Schrödinger-Gleichung $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$

4. Heisenbergsche Unschärferelation $\Delta p \Delta x = \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

Aufg. 3:

$$\nu_1 = \frac{c}{\lambda_1} = \frac{3 \cdot 10^8 \frac{m}{s}}{488 \text{ nm}} = 6,15 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\nu_2 = \frac{c}{\lambda_2} = \frac{3 \cdot 10^8 \frac{m}{s}}{514,5 \text{ nm}} = 5,83 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\tilde{\nu}_1 = \frac{1}{\lambda_1} = 20491,8 \text{ cm}^{-1} \quad \tilde{\nu}_2 = 19436,3 \text{ cm}^{-1}$$

$$E = h \frac{c}{\lambda} \quad E_1 = 4,107 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 2,54 \text{ eV} = 245400 \text{ J mol}^{-1}$$

$$E_2 = 3,886 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 2,41 \text{ eV} = 232600 \text{ J mol}^{-1}$$

Dies entspricht ungefähr der Bindungsenthalpie von Cl_2 (243 $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$)

Quelle: Riedel, Allgemeine und Anorganische Chemie,
Walter de Gruyter GmbH & Co KG Berlin/New York,
10. Aufl. 2010

Aufg. 4)

IR-Spektroskopie: Bei großen Molekülen führt die Absorption zu einer Schwingungsanregung der Bindungen, bei kleineren Molekülen zu einer Rotationsanregung.

Raman-Spektroskopie: Die Probe wird mit einer spezifischen Wellenlänge bestrahlt. Dadurch wird Energie auf die Materie übertragen und bewirkt eine Verschiebung der Wellenlänge des gestreuten Lichts zum eingestrahlteten Licht. Die gemessenen Frequenzen können in Stokes- und Anti-Stokeslinien unterschieden werden.

UV-VIS-Spektroskopie: Die Probe wird mit elektromagnetischen Wellen im Wellenlängenbereich von sichtbarem bis ultraviolettem Licht bestrahlt. Die Valenzelektronen werden dadurch vom HOMO auf das nächst höhere LUMO angehoben, was einem höheren Energieniveau entspricht.

NMR-Spektroskopie: Die Probe wird in ein hochfrequentes magnetisches Wechselfeld gebracht, was zu einer resonanten Wechselwirkung der magnetischen Momente von den Atomkernen der Probe führt. Diese Energie kann auch wieder emittiert werden.

$$\text{Nr. 5} \quad \Delta E = \frac{(n+1)^2 h^2}{8mL^2} - \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \Rightarrow \Delta E = (2n+1) \frac{h^2}{8mL^2}$$

$$\Delta E_4 = (2 \cdot 4 + 1) \frac{h^2}{8m_e L^2} = \frac{9h^2}{8m_e L^2} = 5,43 \cdot 10^{-16} \text{ J}$$

$$\text{mit } m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}, L = 1 \text{ nm}, h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\text{Nr. 6} \quad OD_1(\lambda) = \log\left(\frac{I}{I_0}\right) = 1,12 \quad , \quad OD_2(\lambda) = \log\left(\frac{I}{I_0}\right) = 0,078$$

$$\text{mit } OD = \epsilon(\lambda) \cdot c \cdot L \Leftrightarrow \epsilon(\lambda) = \frac{OD(\lambda)}{c \cdot L}$$

$$\Rightarrow \epsilon_1(\lambda) = \frac{OD_1(\lambda)}{c \cdot L} = 486,045 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ m}^{-1} = 0,486045 \text{ m}^2 \text{ mol}^{-1}$$

$$\Rightarrow c_2 = \frac{OD_2(\lambda)}{\epsilon_2(\lambda) \cdot L} = 0,016 \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$$