

Arbeitsblatt zum Praktikumsversuch im Plenum:
Quantenmechanik und Molekülspektroskopie

Gruppe:

April 20, 2024

QM-1

Wie lauten die vier Grundgleichungen der Quantenmechanik und was sagen sie aus?

1. Energie der Photonen ist gequantelt. $E = h\nu$
Die Energie eines Photons ist immer ein Vielfaches von h , also kann es immer nur bestimmte Energien annehmen.
2. Welle-Teilchen-Dualismus $\lambda = \frac{h}{p}$ oder $p = \frac{h}{\lambda}$
Ein Quantenteilchen hat sowohl Wellen- als auch Teilchecharakter.
3. Unschärferelation $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ (Impuls und Ort) oder $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ (Energie und Zeit)
Von mikroskopischen Objekten ist nie Impuls und Ort bzw. Energie und Lebenszeit gleichzeitig messbar.
4. Schrödinger-Gleichung $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$
Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein mikroskopisches Objekt in einem Ortsintervall befindet.

QM-2:

Der Argon-Ionen-Laser (Ar^+ -Laser) hat starke Emissionslinien bei 488 nm und bei 514,5 nm. Rechnen Sie diese Wellenlängen in die folgenden alternativen Einheiten zur Charakterisierung der Photonenenergie um:

- a) Frequenz in Hz (s^{-1})
488nm: $f = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{488 \cdot 10^{-9} m} = 6,14 \cdot 10^{14} \frac{1}{s}$
514,5nm: $f = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{514,5 \cdot 10^{-9} m} = 5,82 \cdot 10^{14} \frac{1}{s}$
- b) Wellenzahl in cm^{-1}
488nm: $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{488 \cdot 10^{-7} cm} = 2,05 \cdot 10^4 cm^{-1}$
514,5nm: $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{514,5 \cdot 10^{-7} cm} = 1,94 \cdot 10^4 cm^{-1}$
- c) Energie in eV, Energie in J
488nm: $E = h \cdot f = h \cdot 6,14 \cdot 10^{14} = 4,07 \cdot 10^{-19} J$
 $\frac{4,07 \cdot 10^{-19}}{e} = 2,54 eV$
514,5nm: $E = h \cdot f = h \cdot 5,82 \cdot 10^{14} = 3,86 \cdot 10^{-19} J$
 $\frac{3,86 \cdot 10^{-19}}{e} = 2,41 eV$
- d) Energie in kJ/mol
488nm: $4,07 \cdot 10^{-22} kJ \cdot N_A = 245 \frac{kJ}{mol}$
514,5nm: $3,86 \cdot 10^{-22} kJ \cdot N_A = 232 \frac{kJ}{mol}$

Vergleichen Sie die Werte mit typischen Bindungsdissoziationsenthalpien.

Cl_2 : $242 \frac{kJ}{mol}$, N_2 : $945 \frac{kJ}{mol}$, I_2 : $151 \frac{kJ}{mol}$

Die Energie liegt im typischen Bindungsdissoziationsenthalpien-Bereich, wobei sie deutlich im unteren Bereich ist.

QM-3

Die Energiezustände eines Teilchens der Masse m in einem eindimensionalen Kasten der Länge L sind wie folgt gequantel: $E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$

Wie ändert sich der Abstand zwischen benachbarten Energieniveaus

$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$ mit der Quantenzahl n ? Wie groß ist ΔE_4 (in J und eV) für ein Elektron in einem Kasten der Länge $L = 1\text{nm}$ (z.B. ein Farbstoffmolekül)?

$$m = m_e$$

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}n^2 = 0,6 \cdot 10^{-19} J$$

$$E_2 = \frac{h^2}{8mL^2}n^2 = 2,4 \cdot 10^{-19} J$$

$$E_3 = \frac{h^2}{8mL^2}n^2 = 5,4 \cdot 10^{-19} J$$

$$E_4 = \frac{h^2}{8mL^2}n^2 = 9,6 \cdot 10^{-19} J$$

$$E_5 = \frac{h^2}{8mL^2}n^2 = 15 \cdot 10^{-19} J$$

$$\Delta E_1 = 1,8 \cdot 10^{-19} J$$

$$\Delta E_2 = 3 \cdot 10^{-19} J$$

$$\Delta E_3 = 4,2 \cdot 10^{-19} J$$

$$\Delta E_4 = 5,4 \cdot 10^{-19} J = 3,37 eV$$

Der Abstand der Energieniveaus ändert sich exponentiell.

MS-1

Erläutern Sie in Stichworten, wozu Sie die Molekülspektroskopie einsetzen können.

- Eigenschaften von Molekülen
- Bestimmen von Molekülen durch Referenzen

MS-2

Erläutern Sie, was bei den folgenden Spektroskopiearten in einem Molekül angeregt wird:

- IR-Absorptions-Spektroskopie: Es werden Elektronen angeregt, wodurch die Absorption einzelner Wellenlängen bestimmt werden kann.
- Raman-Spektroskopie: Es wird ein Molekül angeregt, sodass ein oszillierender Dipol entsteht, dessen Streuung gemessen wird.
- UV-VIS-Absorptionsspektroskopie: Es werden die Valenzelektronen angeregt, wodurch der elektronische Zustand des Moleküls bestimmt werden kann.
- NMR-Spektroskopie: Es wird ein Magnetfeld angelegt, wodurch die Atomkerne im Molekül angeregt werden.

MS-3

Ein Farbstoff reagiert während einer chemischen Reaktion ab. Dabei wurde die Transmission der Probe vorher und nachher in einer 1cm Küvette untersucht. Vor der Reaktion betrug die Transmission $T_1=7,5\%$ bei einer Farbstoffkonzentration c_1 von $0,23 \text{ mol/L}$. Nach der Reaktion betrug die Transmission $T_2=83,5\%$.

- a) Wie groß ist der molare, dekadische Extinktionskoeffizient ε des Farbstoffs? $O_D = \log_{10} \frac{I_0}{I} = \varepsilon c_0 d$

$$\varepsilon = \frac{\log_{10} \frac{I_0}{I}}{c_0 d} = \frac{\log_{10} \frac{1}{0,075}}{0,23 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,01 \text{m}} = 489 \frac{\text{L}}{\text{mol} \cdot \text{m}}$$

- b) Wie groß ist die Konzentration des Farbstoffs nach der Reaktion?

$$c = \frac{\log_{10} \frac{I_0}{I}}{\varepsilon \cdot d} = \frac{\log_{10} \frac{1}{0,835}}{489 \frac{\text{L}}{\text{mol} \cdot \text{m}} \cdot 0,01 \text{m}} = 0,016 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$