



## Pflichtmodul PC-M

# Spektroskopie und Mikroskopie komplexer Systeme I (SMKS\* I)

## Kapitel 4: Schwingungsspektroskopie

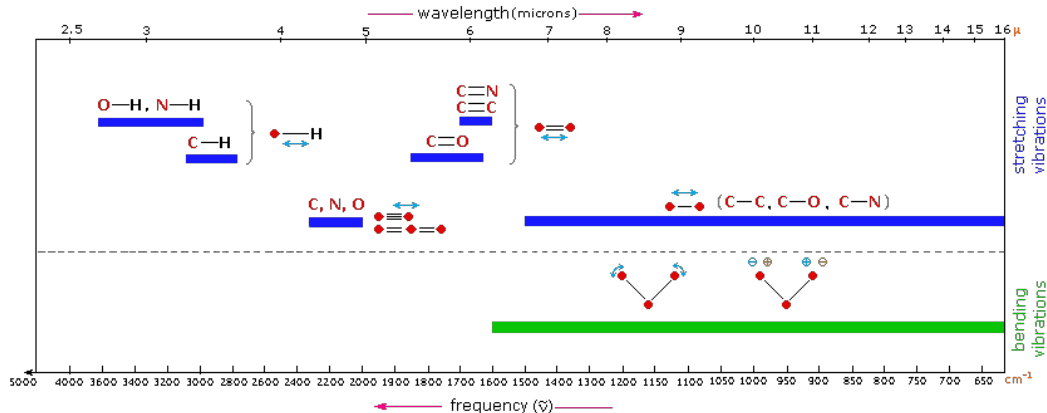
- 4.1 Einführung
- 4.2 Schwingung 2-atomarer Moleküle
- 4.3 Auswahlregeln
- 4.4 Raman-Schwingungsspektroskopie
- 4.5 Anharmonischer Oszillator
- 4.6 Schwingen mehratomiger Moleküle

***Claus Seidel, Jan Meisner, Ralf Kühnemuth, Peter Gilch***  
***Lehrstuhl für molekulare physikalische Chemie***  
***HHU Düsseldorf***

# Schwingungsspektroskopie: Einführung

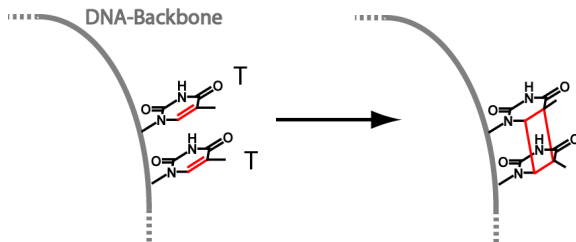
## Analytik:

Schwingungsspektroskopie als molekularer Fingerprint, dominiert durch die Stärke chemischer Bindungen



## Aufklärung von Reaktionsmechanismen:

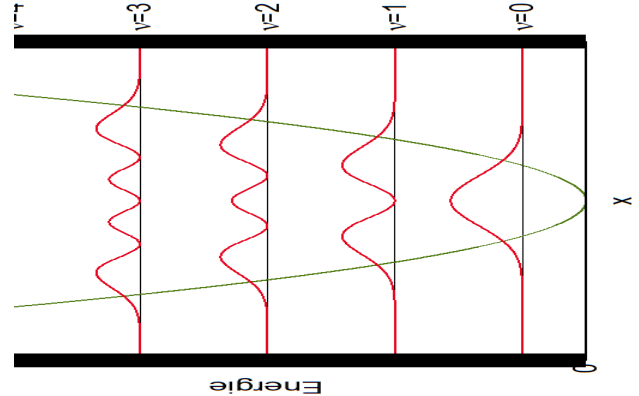
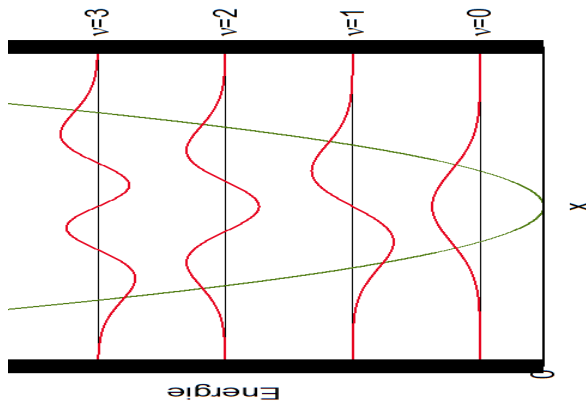
Zeitaufgelöste Schwingungsspektroskopie



UV-Schädigung von DNA (AK Gilch):  
Nach UV-Anregung (z.B. durch Sonnenlicht):  
[2+2]-Cycloaddition zweier Thyminbasen zu einem Dimer (Cylobutanring)

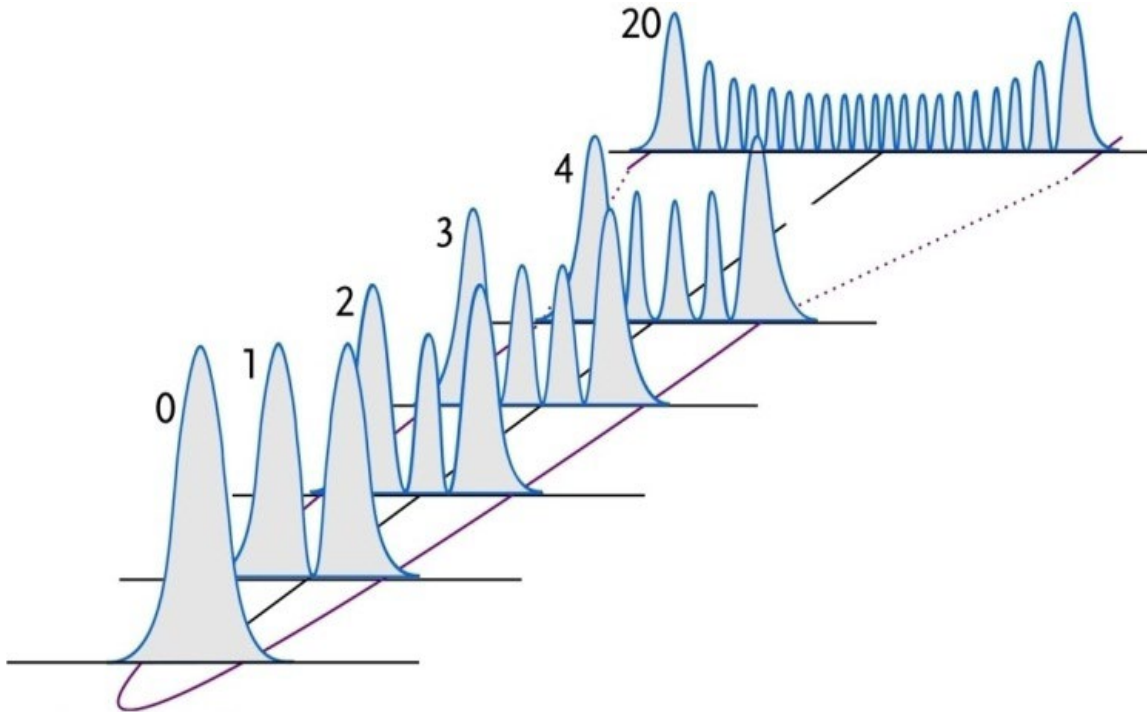


# Der harmonische Oszillator: Wellenfunktionen und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten



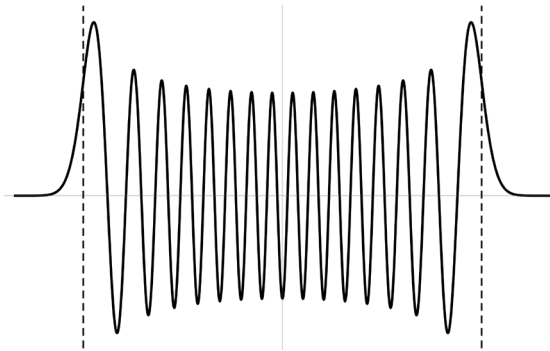
Aufenthaltswahrscheinlichkeit auch außerhalb  
des klassisch erlaubten Bereichs ungleich null.  
→ Quantenmechanischer Tunneleffekt

# Der harmonische Oszillator: Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

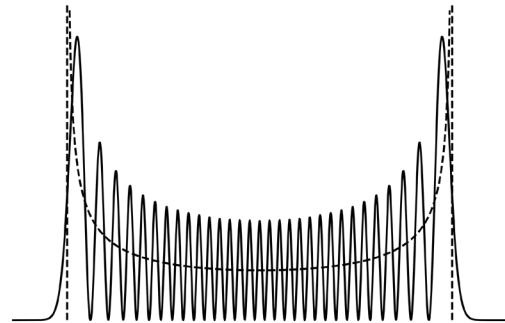


Aufenthaltswahrscheinlichkeit auch außerhalb  
des klassisch erlaubten Bereichs ungleich null.  
→ Quantenmechanischer Tunneleffekt

# Der harmonische Oszillator: Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für $v = 30$ :



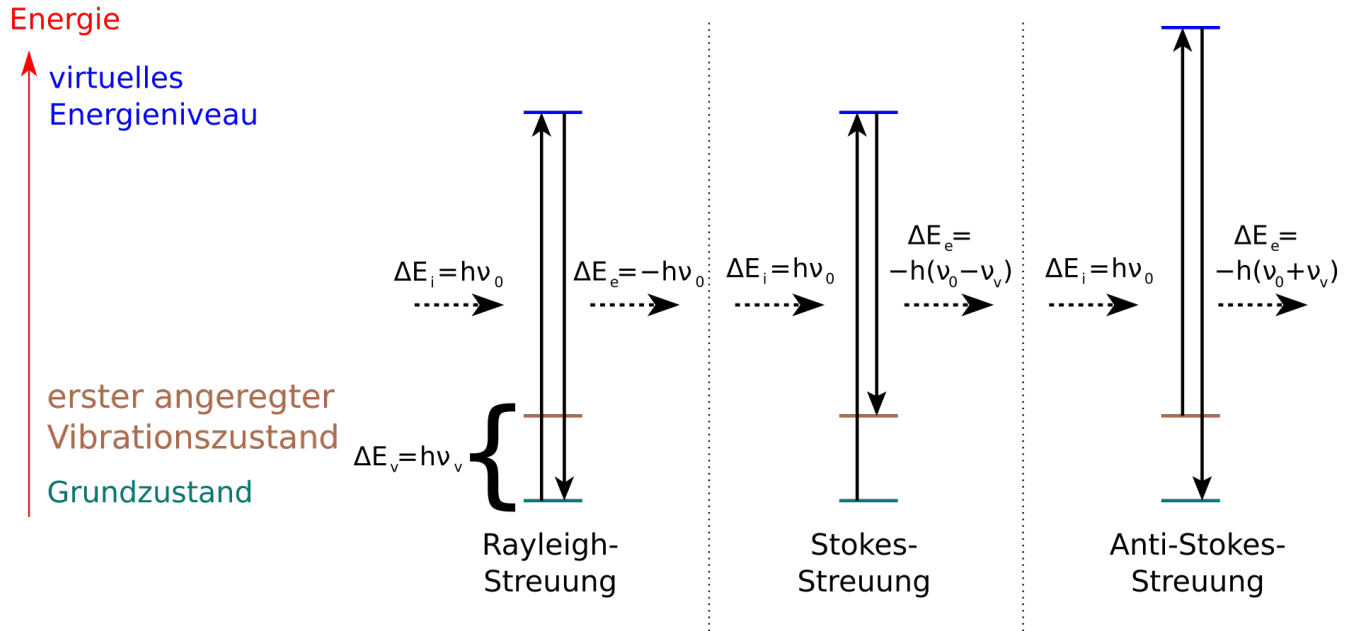
strichliert: klassische Umkehrpunkte



Strichliert: klassische Wahrscheinlichkeitsdichte



# Raman-Schwingungsspektroskopie





# Chandrasekhara Venkata Raman (C.V. Raman)



Indischer Physiker (1888-1970)

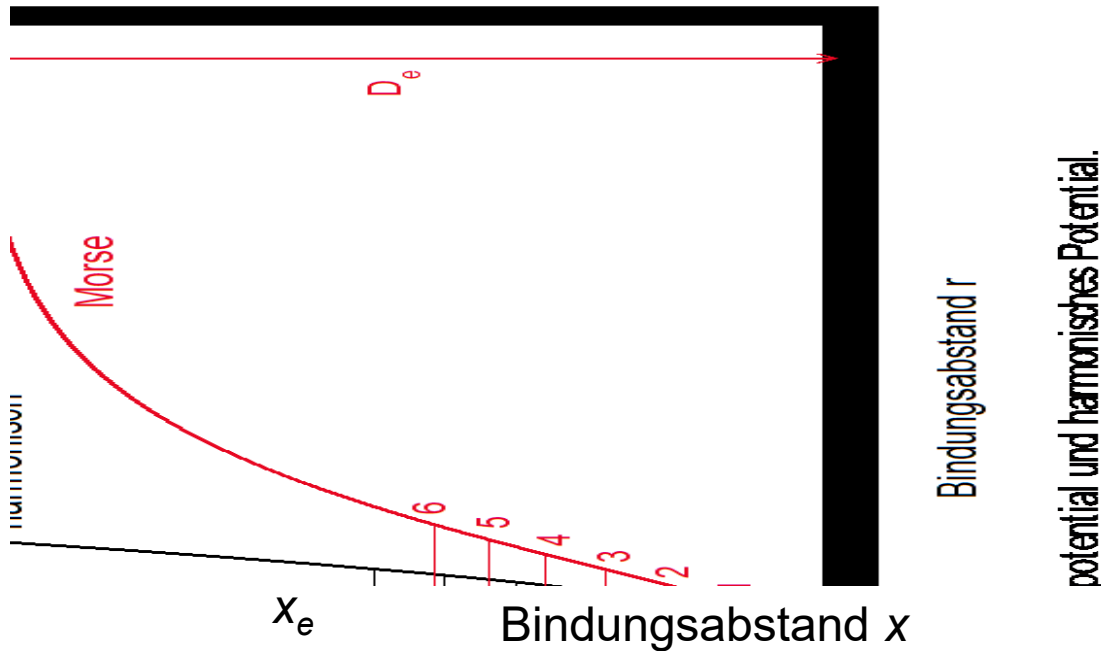
Geboren am 7.11.1888 in Südindien als zweites von acht Kindern. Sein Vater war Lehrer und später „Lecturer“ in Physik und Mathematik

- 1904 Bachelor-Abschluss am Presidency College (Madras), „Goldmedaille in Physik“
- 1906 Erstes Paper erschienen im „The Philosophical Magazine (London)“
- 1907 Master-Abschluss
- 1917 Beamter bei der Finanzbehörde in Kalkutta, „Hobby“: Arbeit für „The Indian Association for the Cultivation of Science“, in dieser Zeit entstehen 30 Paper.
- 1917 Lehrstuhl für Physik an Universität Kalkutta
- 1921 Reise nach Oxford, Beginn der Arbeiten über Lichtstreuung
- 1928 Entdeckung des nach ihm benannten Effekts (Landsberg und Mandelstam machen in Moskau unabhängig die gleiche Entdeckung)
- 1930 Nobelpreis für Physik (erster Asiate)
- 1933-48 Indian Institut of Science



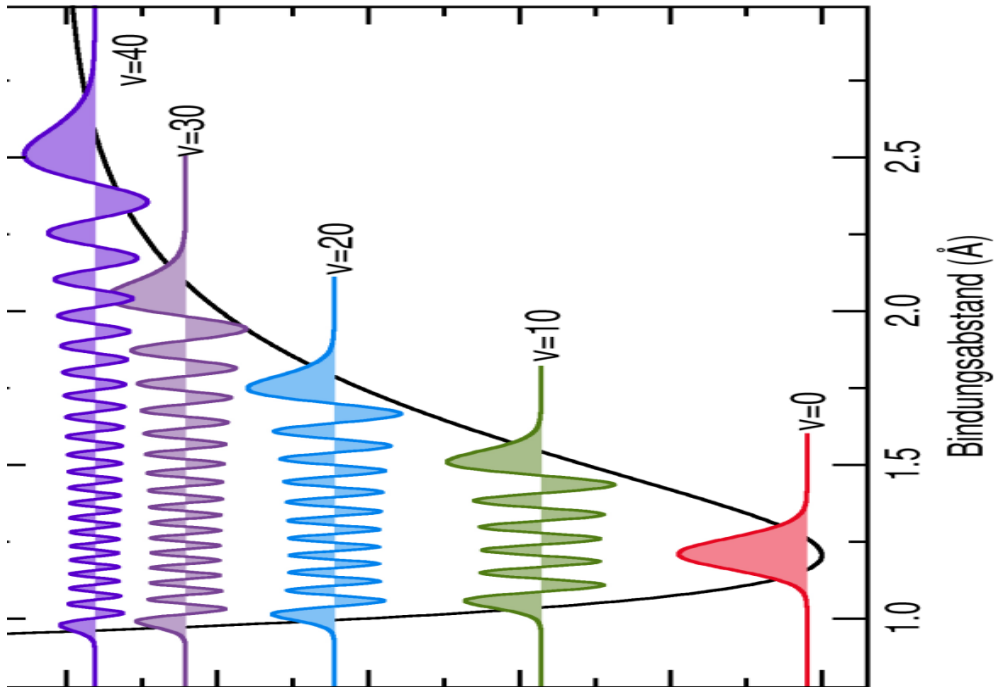
# Der Anharmonische Oszillator

Morsepotential und harmonisches Potential:



# Der Anharmonische Oszillator

Morsepotential und Schwingungsfunktionen für  $O_2$ :

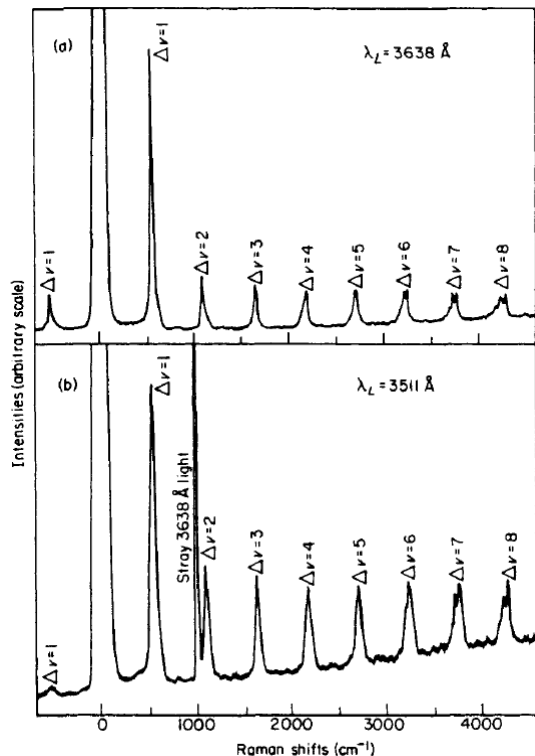


Morsepotential und Schwingungsfunktionen für  $O_2$ .





# Der Anharmonische Oszillator



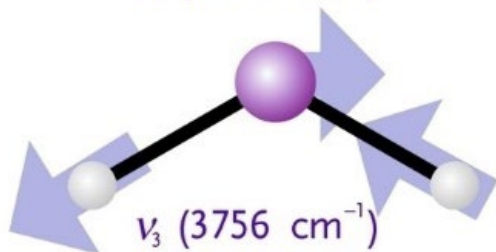
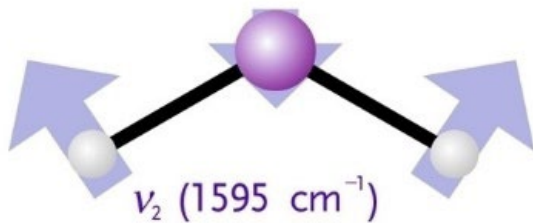
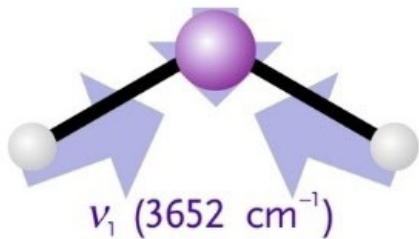
Durch Obertöne kann man experimentelle Hinweise auf die Form der Potentialkurve erhalten.

Links: Resonanz-Raman-Spektrum von gasförmigen Chlor ( $\text{Cl}_2$ ) mit Obertönen. Wegen der Anharmonizität sind die Peaks nicht exakt äquidistant:





# Normalmodenanalyse: Beispiel H<sub>2</sub>O



# Normalmodenanalyse: Beispiel

---