

## A51 Infrarot-Absorptions-Spektroskopie

### Aufgabe

Es ist das Rotations-Schwingungsspektrum von gasförmigem CO mit einem Fourier-Transform Infrarot (FTIR) Spektrometer aufzunehmen. Bei der Spektrenauswertung sind Schwingungsfrequenz, Kraftkonstante der Bindung sowie Rotationskonstanten, Trägheitsmomente und Bindungsabstände im CO-Molekül zu bestimmen.

### Grundlagen

Molekülschwingungen und -rotationen werden durch Absorption von Strahlung im infraroten Bereich des elektromagnetischen Spektrums angeregt. Die aufzuwendende Energie hängt von der Masse der beteiligten Atome und den zwischen ihnen wirkenden Bindungskräften ab. Daher absorbieren unterschiedliche funktionelle Gruppen bei verschiedenen bekannten Frequenzen, so dass das resultierende IR-Spektrum dem Fingerabdruck einer Substanz entspricht.

### Spektrometer

Die Spektroskopie untersucht die Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie.

Die wesentlichen Komponenten eines Absorptionsspektrometers sind Strahlungsquelle, Probenküvette, Monochromator und Detektor. Das Verhältnis zwischen der auf die Probe eingestrahlten Intensität  $I_0$  und der transmittierten Intensität  $I$  hängt nach dem Lambert-Beerschen-Gesetz wie folgt von den experimentellen Parametern ab.

$$\text{Extinktion: } E = \log_{10} \frac{I_0}{I} = \varepsilon_\nu \cdot [\text{CO}] \cdot l \quad (1)$$

Der somit von der Küvettenlänge  $l$  und der Konzentration an gasförmiger Probe  $[\text{CO}]$  unabhängige molare dekadische Extinktionskoeffizient  $\varepsilon_\nu$  hängt von der Frequenz  $\nu$  des

eingestrahlt Licht ab, seine oder eine dazu proportionale Auftragung als Funktion der Wellenlänge nennt man das Absorptionsspektrum des untersuchten Moleküls.

Im (hier nicht verwendeten) klassischen Spektrometer wird die Spektrenaufzeichnung realisiert durch einen Monochromator im Strahlengang, welcher das Licht einer Wellenlänge heraussortiert, im klassischen Fall durch ein Prisma oder ein optisches Gitter für den sichtbaren Spektralbereich.

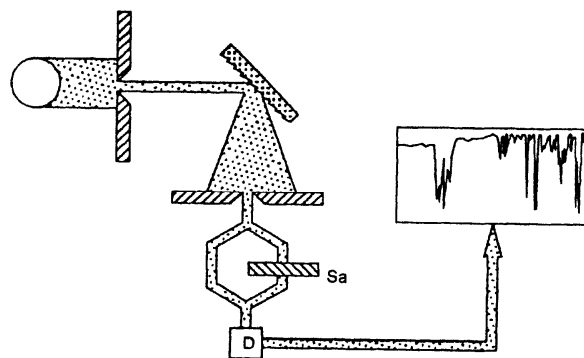
Der Detektor wandelt schließlich die Intensität der elektromagnetischen Strahlung in eine dazu proportionale elektrische Größe um (Photospannung), welche auf einen Schreiber gelegt bzw. vom Rechner eingelesen wird.

### **Fourier-Transform-Spektroskopie**

Beim Fourier-Transform-Spektrometer werden zu jedem Aufnahmezeitpunkt alle Wellenlängen gleichzeitig gemessen. Anstelle des Monochromators wird hier ein sog. Michelson-Interferometer verwendet, welches die Interferenzeigenschaften des Lichts ausnutzt, um die spektrale Information für jede Wellenlänge mit Hilfe der Fourier-Transformation berechenbar zu machen. Dabei wird der von der Strahlungsquelle und bereits durch die Probe geführte Lichtstrahl in zwei Teilstrahlen aufgeteilt, von denen der eine über einen feststehenden Spiegel reflektiert eine feste Weglänge passieren muss, während der andere durch Reflexion an einem verschiebbaren Spiegel hinsichtlich der Weglänge variiert werden kann. Beim Wiederzusammentreffen kommt es somit je nach Phasenlage zu konstruktiver (Verstärkung) bzw. destruktiver (Auslöschung) Interferenz der beiden Teilstrahlen, womit der Detektor die ankommende Intensität als Funktion der Ortsposition des variablen Spiegels in einem sog. Interferogramm aufzeichnen kann. Durch die mathematische Behandlung der Fourier-Transformation lässt sich aus dem gemessenen Interferogramm das zugehörige Absorptionsspektrum ermitteln.

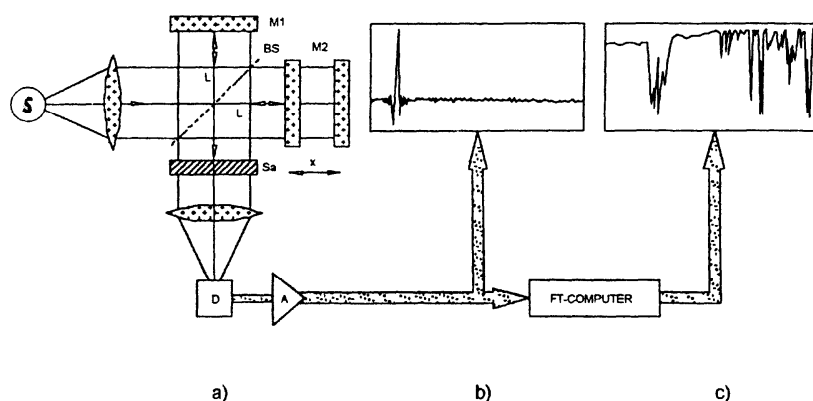
*Infrarotspektroskopie heute: FT – IR (Auszug aus dem „Benutzer – Handbuch IFS 28“)*

Die ursprüngliche Methode, das IR-Spektrum eines Stoffes zu erhalten, beruhte auf dem direkten Vergleich einer zeitlich veränderlichen monochromatischen Strahlung, die durch eine Substanzprobe **S** tritt, mit einem ungeschwächten Referenzstrahl (s. **Abb. 1**).



**Abb. 1:** Die klassische IR-Methode

Das Intensitätsverhältnis der beiden Strahlen wurde von einem direkt mit dem Monochromator (Prisma oder Beugungsgitter) gekoppelten Schreiber aufgezeichnet.



**Abb. 2:** Die FT-IR-Methode

Die von uns verwendete Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie ist die fortschrittlichste Methode der Infrarot-Spektroskopie. Sie ermöglicht alle Frequenzen eines weiten Gebietes innerhalb des IR-Bereiches gleichzeitig zu messen. Den wesentlichen Teil der Optik eines FT-IR-Spektrometers bildet das Interferometer. **Abb. 2 a)** gibt das Schema eines idealisierten Michelson-Interferometers wieder.

Breitbandige Infrarot-Strahlung wird von einer thermischen Quelle **S** emittiert und fällt auf einen Strahlenteiler **BS**, der im Idealfall die eine Hälfte des einfallenden Lichts durchlässt und die andere reflektiert. Der reflektierte Teil trifft nach einer Strecke **L** auf den fest montierten Spiegel **M1**, wird dort erneut reflektiert und fällt nach Zurücklegen einer Gesamtstrecke von **2L** zum zweiten Mal auf den Strahlenteiler. Ähnliches geschieht mit dem durchgelassenen Teil.

Da jedoch der Spiegel **M2** dieses Interferometersarms nicht fest montiert, sondern auf der optischen Achse auf der Position **L** sehr präzise um eine Strecke **x** vor und zurück verschiebbar ist, beträgt die gesamte Wegstrecke hier entsprechend **2(L+x)**. Infolgedessen weisen die beiden Strahlhälften beim Rekombinieren auf dem Strahlteiler eine Wegdifferenz von **2x** auf. Da die beiden Strahlhälften räumlich kohärent sind, interferieren sie miteinander.

Der durch die Spiegelbewegung modulierte Strahl verlässt das Interferometer, passiert den Probenraum **Sa** und wird schließlich auf den Detektor **D** fokussiert. Die dem Detektor registrierte Größe – das Interferogramm – ist somit die Intensität **I(x)** der IR-Strahlung in Abhängigkeit von der Auslenkung **x** des beweglichen Spiegels **M2** aus der Position **L** (s. **Abb. 2b**).

Die in einem Computer durchgeführte rechnerische Umwandlung eines Interferogramms – die Fourier-Transformation – ergibt zunächst das sogenannte Einkanalspektrum. Das Verhältnis dieses Einkanalspektrums zu einer ohne Probe aufgenommenen Referenz ergibt dann eine dem konventionell gemessenen Spektrum analoge Darstellung. Dieses Spektrum liegt unmittelbar zur weiteren Auswertung im Rechner digital gespeichert vor (s. **Abb. 2c**).

Gegenüber der konventionellen IR-Spektroskopie weist die FT-IR-Methode folgende wesentliche Vorteile auf:

- In konventionellen Spektrometern wird das Spektrum direkt gemessen, indem die Intensität bei sich kontinuierlich ändernder Monochromatoreinstellung nacheinander Wellenzahl für Wellenzahl registriert wird. Je nach Wahl der spektralen Auflösung trifft nur ein sehr geringer Teil (im Realfall durchschnittlich weniger als 0,1%) der in den Monochromator eintretenden Strahlung auf den IR-Detektor. Im FT-IR-Spektrometer treffen alle von der IR-Quelle ausgesandten Frequenzen gleichzeitig auf den Detektor, was den **Multiplex-** oder **Fellgett-Vorteil** der FT-IR-Technik ausmacht.
- Ein weiterer Vorteil ergibt sich aus der Tatsache, dass die kreisförmigen Blenden, die in FT-IR-Spektrometern verwendet werden, wegen ihrer größeren Fläche einen um mindestens den Faktor 6 höheren Strahlungsdurchsatz ermöglichen als die linearen Spalte von Gittergeräten. Dieser Vorteil wird als **Jacquinot-Vorteil** bezeichnet.

- Die Messzeit ist in der FT-IR-Spektroskopie diejenige Zeit, die der Spiegel **M2** benötigt, um den für die gewünschte Auflösung notwendigen Weg zurückzulegen. Da der Spiegel sehr schnell bewegt werden kann, sind vollständige Spektren in Bruchteilen einer Sekunde erhältlich, während im Gegensatz dazu die Registrierzeit eines konventionellen Spektrums im Bereich von Minuten liegt.
- Die Wellenzahlgenauigkeit eines FT-Spektrums ist direkt gekoppelt mit der Positionsbestimmung des bewegten Interferometerspiegels. Mit Hilfe eines HeNe-Laser-Hilfsinterferometers kann die Spiegelposition auf besser als 0,000005 mm (ca. 1/100 der Laser-Wellenlänge) bestimmt werden. Hieraus resultiert die enorm hohe Wellenzahlgenauigkeit von FT-IR-Spektren, die bei Werten besser als 0,01  $\text{cm}^{-1}$  liegt. Dieser Vorteil der FT-Technik, wird als **Connes-Vorteil** bezeichnet. Eine Konsequenz dieser Eigenschaft ist die Möglichkeit, direkte Vergleiche von IR-Spektren im Rechner durchzuführen. Geringfügige spektrale – und damit gegebenenfalls probenspezifische – Unterschiede können durch Differenzbildung sehr präzise ermittelt werden. Schließlich eröffnet die FT-IR-Methode das außerordentlich weite Feld der Identifikations- und Interpretationshilfe durch den rechnerischen Vergleich gemessener Spektren gegen digital gespeicherte Spektrenbibliotheken.

### **Quantenmechanische Behandlung von Schwingung und Rotation**

Das Auftreten diskreter Linien im hochaufgelösten Infrarotspektrum lässt sich mit der klassischen Physik nicht in Einklang bringen. Die Quantelung der Energiezustände von mikroskopische kleinen Teilchen macht nur Übergänge zwischen bestimmten Energieniveaus möglich, somit ist bei hochaufgelösten Spektren kein kontinuierlicher Verlauf der Absorptionsintensität aufzufinden.

Mit Infrarotstrahlung werden die Schwingung der Kerne (nicht der Elektronen!) im Molekül CO und gleichzeitig damit auch die Rotation des Moleküls an- bzw. abgeregt. Da wegen der Born-Oppenheimer-Näherung sich auf der Zeitskala der Kernbewegung der Einfluss der Elektronen in Form einer Potentialkurve äußert, lässt sich die Schwingungsbewegung der Kerne in erster Näherung als die eines Massepunkts in einem harmonischen Potential beschreiben, wobei folgende Schrödingergleichung zu lösen ist:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + \frac{1}{2} kx^2 \Psi(x) = E \cdot \Psi(x) \quad (2)$$

(Kraftkonstante  $k$ ; reduzierte Masse  $\mu = m_c m_o (m_c + m_o)^{-1}$ ;  $m_c, m_o$  Masse des Kohlenstoff- bzw. Sauerstoffatoms). Für die physikalisch sinnvollen Lösungen der Schrödingergleichung ergeben sich als erlaubte Energieniveaus

$$E(v) = hc \tilde{\nu}_0 \left( v + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit } v = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

$$\tilde{\nu}_0 = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (4)$$

äquidistante Werte für die erlaubten Energieniveaus, d.h. die Abstände sind jeweils gleich der klassischen Schwingungsfrequenz  $\tilde{\nu}_0$  (siehe **Abb. 4**, Potentialkurve des harmonischen Oszillators).

Die Rotation eines Moleküls spielt sich auf einer viel langsameren Zeitskala ab als die Schwingung, in guter Näherung lässt sich dadurch diese Bewegung mit der des starren Rotators beschreiben, wobei folg. Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right] = E \cdot \Psi(\vartheta, \varphi) \quad (5)$$

mit  $I = \mu R^2$  als Trägheitsmoment ( $R$ : Gleichgewichts-Kern-Kern-Abstand) zu lösen ist. Die Energieeigenwerte des starren Rotators genügen der Formel

$$E(J) = hcBJ(J+1) \quad \text{mit } J = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

$$B = \frac{h}{8\pi^2 c \mu R^2} \quad (7)$$

$B$  wird als Rotationskonstante bezeichnet. Die Rotationsenergieniveaus sind nicht äquidistant.

## Auswahlregeln

Ein Molekül kann im Infrarotbereich nur dann die Energie der elektromagnetischen Strahlung in Schwingungs- oder Rotationsenergie verwandeln, wenn es die speziell für jede Bewegungsform geltenden globalen Auswahlregeln erfüllt:

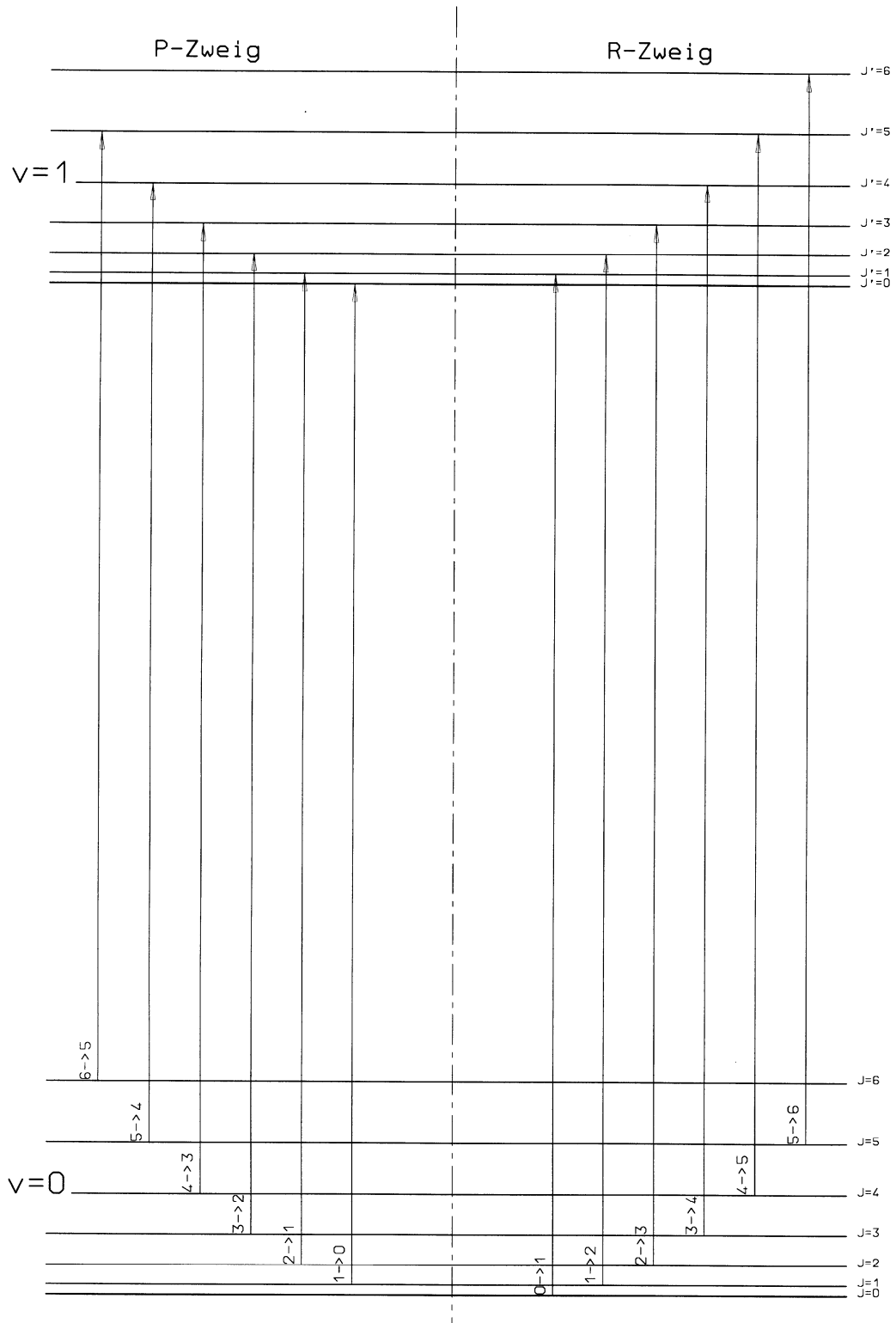
- Für die Rotation muss gelten, dass das Molekül ein permanentes elektrisches Dipolmoment besitzt (analog einer Antenne als Hertzschen Dipol). Deshalb sind keine direkten Rotationsanregungen mit elektromagnetischer Strahlung im Mikrowellenbereich bei symmetrischen Molekülen wie  $N_2$ ,  $O_2$  und  $CO_2$  möglich.
- Bei den Schwingungsübergängen verlangt die globale Auswahlregel, dass sich das elektrische Dipolmoment des Moleküls als Funktion des Kern-Kern-Abstands ändern muss, damit sind zweiatomige Moleküle wie  $N_2$  und  $O_2$  IR-inaktiv, jedoch sind nun Schwingungsübergänge bei einzelnen Schwingungsmoden im  $CO_2$  erlaubt (z.B. antisymmetrische Streckschwingung).
- Zusätzlich zu den globalen Auswahlregeln, die auf jeden Fall erfüllt sein müssen, kommen aufgrund der Auswertung des Matrix-Übergangsdipolmoments für Vibration und Rotation spezielle Auswahlregeln hinzu, welche die Änderung der Quantenzahlen auf wenige Möglichkeiten einschränkt ( $\Delta v = \pm 1$  bei der Schwingung und  $\Delta J = \pm 1$  bei der Rotation).

Das Zusammenwirken der globalen und speziellen Auswahlregeln und die Quantelung der Energieniveaus eines heteronuklearen zweiatomigen Moleküls bewirken (äquidistante Schwingungsniveaus, Zunahme benachbarter Rotationsniveauabstände um jeweils  $2B$ ), dass ein Bandenspektrum mit P- und R-Zweig und verschwindendem Q-Zweig im Bereich der Schwingungsfrequenz auftritt, bei dem sich bei hinreichender Auflösung die einzelnen Rotationsübergänge klar zuordnen lassen (siehe dazu **Abb. 3**, Rotations-Schwingungs-Übergänge). Aus einem solchen Spektrum lassen sich somit die Rotationskonstante und Schwingungsfrequenz und daraus Molekülparameter wie Bindungslänge und Federkonstante der harmonischen Schwingung bestimmen.

Die Intensität eines Übergangs hängt von zwei Faktoren ab! Die Auswahlregeln gelten streng nur für das Modell des harmonischen Oszillators bzw. des starren Rotators, sog. verbotene Übergänge, die beispielsweise spezielle Auswahlregeln wie  $\Delta v = \pm 1$  verletzen, können trotzdem im Spektrum auftreten, deren Intensität ist aber meist um Größenordnungen geringer. Das Intensitätsmuster der einzelnen Banden (exponentieller Abfall mit

zunehmendem Abstand von der Schwingungsfrequenz, jedoch Anstieg in unmittelbarer Umgebung der Schwingungsfrequenz) lässt sich mit den unterschiedlichen Besetzungszahlen der Rotationszustände erklären (Boltzmannverteilung und quantenmechanische Entartung).

**Abb. 3:** Rotations - Schwingungs - Übergänge

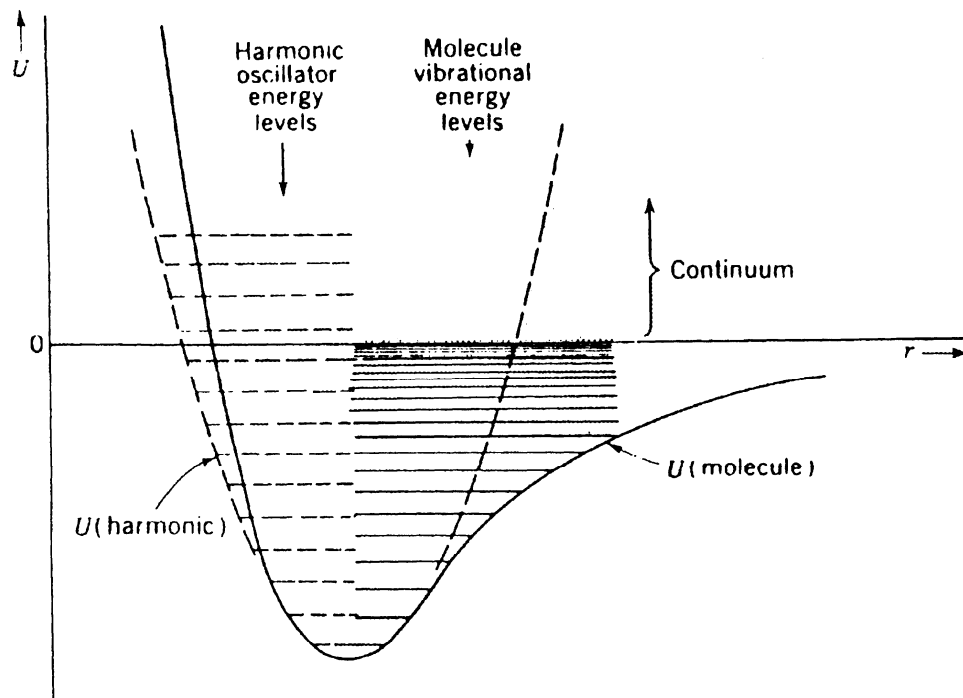


## Korrekturen

In erster Näherung (d.h. wenn die Separierung der Kernbewegung in Rotation und Schwingung zulässig ist) addieren sich Rotationsenergie und Schwingungsenergie zur Gesamtenergie der Kernbewegung im Schwerpunktkoordinatensystem. Gilt diese Näherung nicht mehr, so lässt sich als erste Korrektur die Rotations-Schwingungs-Kopplungskonstante  $\alpha_e$  einführen, damit die Gesamtenergie sich mit folgender Formel errechnen lassen

$$\frac{E(v,J)}{hc} = \tilde{\nu}_0 \left( v + \frac{1}{2} \right) + B_v J(J+1) + \alpha_e \left( v + \frac{1}{2} \right) \cdot J(J+1) \quad (8)$$

Bei größeren Auslenkungen aus der Gleichgewichtslage der Kerne treten Anharmonizitäten in der Potentialkurve des zweiatomigen Moleküls auf (s. **Abb. 4**), so dass der mittlere Kernabstand mit zunehmender Schwingungsquantenzahl ansteigt, weil die Bindungsstärke bei höherer Anregung nachlässt. Analog gilt für zu starke Annäherung der beiden Kerne eine verstärkte Abstoßung, die mit dem Pauli-Prinzip erklärt werden muss (nicht mit der elektrostatischen Abstoßung der beiden positiv geladenen Kerne!). Diese Anharmonizität führt dazu, dass nun auch Übergänge bezüglich der Schwingungsquantenzahl  $\Delta v = \pm 2, \pm 3, \dots$  möglich sind, deren Intensitäten aber deutliche geringer sind. Ferner zeigt auch die im anharmonischen Fall jeweils ermittelte Rotationskonstante  $B$ , gerechnet für die einzelnen Übergänge  $0 \rightarrow 1$  und  $0 \rightarrow 2$  die Tendenz, bei höheren Anregungen etwas abzunehmen, da mit wachsendem Bindungsabstand das Trägheitsmoment größer wird.

**Abb. 4:** Harmonischer und anharmonischer Oszillator

### Durchführung

Die Spektrenaufnahme vollzieht sich in zwei Schritten, wobei bei der Aufnahme des Hintergrundspektrums der Strahlengang im Spektrometer frei bleibt und erst bei Aufnahme des Probenspektrums die Küvette mit der CO-Gasprobe eingesetzt wird. Nach der Aufnahme sollte die Probenküvette wegen der Wasserempfindlichkeit der KBr-Fenster möglichst schnell wieder in den Exsikkator zurücküberführt werden. Auch sollte darauf geachtet werden, dass beim Einsetzen die Durchgangsfenster nicht mit den Fingern berührt werden.

Eine Schritt-für-Schritt-Prozedur zur Bedienung des FTIR-Spektrometers und des Messprogramms liegt am Messplatz aus

Für die Auswertung soll das Gesamtspektrum auf die Energiefenster eingeschränkt werden, bei denen der Grundton bzw. der 1. Oberton der Schwingung auftritt. Das Programm erlaubt eine Markierung der Rotationspeaks mit den entsprechenden Wellenzahlen. Ausgedruckt werden soll eine Übersicht von Hintergrund- und Probenspektrum über den gesamten zur Verfügung stehenden Frequenzbereich, ferner die detaillierten Spektrenabschnitte von Grund- und Oberton mit den entsprechenden Übergangswellenzahlen im Spektrum.

## Auswertung

- Zunächst sollen in den ausgedruckten Spektren des Grund- und 1. Obertons die Rotationsübergänge im P- und R-Zweig eindeutig zugeordnet und entsprechend markiert werden. Eine Tabelle der Rotationsquantenzahlen mit den entsprechend zugeordneten Wellenzahlen ist zu erstellen.
- Wegen der Anharmonizität erwartet man unterschiedliche Rotationskonstanten für den Schwingungsgrundzustand  $B_0$ , für den 1. angeregten Zustand  $B_1$  und den 2. angeregten Zustand  $B_2$ . Durch geschickte Auftragung von Differenzen der Linien des Grundtons ( $\tilde{\nu}_{R(J)} - \tilde{\nu}_{P(J)}$  gegen  $4J+2$ ) kann man  $B_1$  bzw.  $B_0$  ( $\tilde{\nu}_{R(J-1)} - \tilde{\nu}_{P(J+1)}$  gegen  $4J+2$ ) ermitteln. In gleicher Weise erhält man  $B_2$  und noch einmal  $B_0$  aus den Linien des Obertons. Die entsprechenden linearen Regressionen mit graphischer Auftragung und eine Fehlerbestimmung bezüglich der Rotationskonstanten sind anzuschließen. Ferner sollen aus den drei Rotationskonstanten jeweils Trägheitsmomente und Bindungsabstände der der Schwingungszustände  $v=0$ ,  $v=1$  und  $v=2$  ermittelt werden.
- Die Frequenz des im Q-Zweig verbotenen, reinen CO-Schwingungsübergangs  $\tilde{\nu}_{01}$ , lässt sich ermitteln, indem man  $(\tilde{\nu}_{R(J-1)} + \tilde{\nu}_{P(J)})/2$  gegen  $J^2$  aufträgt. Ferner liefert diese Auftragung (Schwingungsfrequenz ist Achsenabschnitt der Ausgleichsgeraden) mit der ermittelten Geradensteigung ein Maß für die Rotations-Schwingungs-Kopplung. Aus der klassischen Formel des harmonischen Oszillators berechne man zudem die Kraftkonstante der CO-Bindung.
- Die Übergangsfrequenz des ersten Schwingungsobertons  $\tilde{\nu}_{02}$  ist nach demselben Verfahren zu bestimmen, daraus berechne man die Anharmonizität  $\tilde{\nu}_{01,x_e}$  der Schwingung.
- Man diskutiere kurz den Intensitätsverlauf der Rotationslinien innerhalb der einzelnen Banden und erkläre die geringe Intensität des 1. Obertons im Vergleich zum Grundton. Ferner sind auch die evtl. auftretenden Asymmetrien (z.B. Abstände im R-Zweig dichter als im P-Zweig) zu erläutern.
- Alle numerischen Ergebnisse sollten mit der Fehlerangabe in einer abschließenden Tabelle zusammengefasst werden und darin ein Vergleich mit entsprechenden Literaturwerten vorgenommen werden.

**Auswertungsformeln**

$$\text{Grundton:} \quad \tilde{\nu}_{R(J)} - \tilde{\nu}_{P(J)} = B_1(4J + 2) \quad (9)$$

$$\tilde{\nu}_{R(J-1)} - \tilde{\nu}_{P(J+1)} = B_0(4J + 2) \quad (10)$$

$$\text{Oberton:} \quad \tilde{\nu}_{R(J)} - \tilde{\nu}_{P(J)} = B_2(4J + 2) \quad (9a)$$

$$\tilde{\nu}_{R(J-1)} - \tilde{\nu}_{P(J+1)} = B_0(4J + 2) \quad (10a)$$

$$\text{Grundton:} \quad \frac{1}{2}(\tilde{\nu}_{R(J-1)} + \tilde{\nu}_{P(J)}) = \tilde{\nu}_{01} + \text{const} \cdot J^2 \quad (11)$$

$$\text{Oberton:} \quad \frac{1}{2}(\tilde{\nu}_{R(J-1)} + \tilde{\nu}_{P(J)}) = \tilde{\nu}_{02} + \text{const} \cdot J^2 \quad (12)$$

$$\text{Anharmonizität:} \quad \tilde{\nu}_{02} = 2 \cdot \tilde{\nu}_{01} - 2 \cdot \tilde{\nu}_{01} x_e \quad (13)$$

**Abschließende Bemerkungen**

Das Versuchsprotokoll dient der Auswertung und Interpretation eines physikalisch-chemischen Experiments. Die dazu erforderliche Theorie soll lediglich kurz skizziert werden und die zur Auswertung benötigten Formeln knapp und übersichtlich aufgelistet werden. Ausführliche Herleitungen und Beweise in der Protokollausarbeitung sollten vermieden werden.

Die Verwendung von Digitalrechnern zur Erstellung der Auftragungen nach den Vorgaben der Auswertung und die nachfolgenden rechnerische lineare Regression sind zulässig und erwünscht. Ein Anwendungsprogramm wie z. B. Origin liefert Ihnen im Rahmen der linearen Regression gleich die Fehler von Steigung und Achsabschnitt. Im Programm Excel muss diese Option erst aktiviert werden. Die Auftragungen und Regressionen können natürlich auch handschriftlich bzw. grafisch durchgeführt werden.

**Was man wissen sollte**

Grundlagen der Quantenmechanik, Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators mit Lösungen, Starrer Rotator mit Lösungen, Bornsche Interpretation der Wellenfunktion, Born-Oppenheimer-Näherung.

Grundlagen der Spektroskopie, Anwendung verschiedener Spektralbereiche (Infrarot-, Mikrowellen-, UV-VIS-Bereich), Lambert-Beer-Gesetz, Termschema, Auswahlregeln, Übergangsdipolmoment, Obertöne, anharmonische Korrekturen

Grundlagen der Fouriertransformation, Vorteile gegenüber herkömmlicher Spektroskopie, Signal/Rausch-Verhältnis

**Literatur**

J.M. Hollas *High Resolution Spectroscopy*, Butterworths 1982, p. 149ff

D.P. Schoemaker, C.W. Garland, J.W. Nibler *Experiments in Physical Chemistry*, 5<sup>th</sup> edition, p. 461 ff

G. Wedler *Physikalische Chemie*, 3. Auflage 1987, S. 549ff

P.W. Atkins *Physikalische Chemie*