

Experimentalphysik V *–Molekülphysik–* WS 2005/06–Prof. V.Kempton

INHALTSVERZEICHNIS

1 EINLEITUNG

- 1.1 Was ist ein Molekül?
- 1.2 Ziele und Methoden der Molekülphysik
- 1.3 Bedeutung der Molekülphysik
- 1.4 Umfang der Vorlesung

2 EIGENSCHAFTEN VON MOLEKÜLEN (Übung)

- 2.1 Mechanische Eigenschaften von Molekülen
- 2.2 Elektrische Eigenschaften von Molekülen
- 2.3 Magnetische Eigenschaften von Molekülen

3 QUANTENMECHANISCHE BEHANDLUNG DER MOLEKULAREN FREIHEITSGRADE

- 3.1 Trennung von Kern- und Elektronenbewegung: Born-Oppenheimer-Näherung
- 3.2 Übersicht über die Spektren von Molekülen

4 EINFÜHRUNG IN DIE THEORIE DER CHE- MISCHEN BINDUNG

- 4.1 Vorbemerkungen
- 4.2 Die Variationsmethode
- 4.3 H_2^+ -Molekül
- 4.4 H_2 -Molekül
- 4.5 Hartree-Methode zur Behandlung von Mehrelektronen-Molekülen
- 4.6 MO-Methode für polyatomige Moleküle
- 4.7 Hückel-Verfahren für Benzol

5 KERNBEWEGUNG IN MOLEKÜLEN

- 5.1 Schrödinger–Gleichung für die Kernbewegung
- 5.2 Behandlung der Kernbewegung für kleine Auslenkungen aus der Ruhelage
 - 5.2.1 Behandlung der Rotation: Starrer Rotator
 - 5.2.2 Behandlung der Vibration: Harmonischer Oszillator
- 5.3 Schwingungen mehr-atomiger Moleküle
- 5.4 Realistische Behandlung der Kernbewegung
 - 5.4.1 Vibrations–Rotations–Kopplung
 - 5.4.2 Nicht starrer Rotator
 - 5.4.3 Anharmonische Schwingungen

6 WECHSELWIRKUNG VON MOLEKÜLEN MIT ELEKTROMAGNETISCHER STRAHLUNG

- 6.1 Raten für Absorption und stimulierte Emission
- 6.2 Reine Rotationsübergänge
- 6.3 Vibrations/Rotations–Übergänge
- 6.4 Elektronische Übergänge (Franck–Condon–Prinzip)
- 6.5 Auswahlregeln für Dipolübergänge
- 6.6 Behandlung der Lichtstreuung (Raman–Effekt)

7 MOLEKÜL–SPEKTROSKOPIE

- 7.1 Mikrowellenspektroskopie (Rotationsspektroskopie)
- 7.2 Infrarot–Spektroskopie (Vibrationsspektroskopie)
- 7.3 Vibronische Spektren
 - 7.3.1 Laserspektroskopie
 - 7.3.2 Photoelektronen–Spektroskopie
- 7.4 Kernresonanz–Spektroskopie (NMR)
 - 7.4.1 Grundlagen
 - 7.4.2 Experimentelles
 - 7.4.3 Protonenresonanz in Molekülen
 - 7.4.4 Ortsaufgelöste Kernspin-Resonanz

8 STREUPROZESSE

8.1 Einführung

8.2 Grundlegende Begriffe:
Differentieller und integraler Streuquerschnitt

8.3 Elastische Stöße:
klassische Behandlung und quantenmechanische Korrekturen

8.4 Vibrations–inelastische Stöße und reaktive Streuung

8.5 Elektronisch–inelastische Stöße:
Semiklassische Behandlung von symmetrischem Ladungsaustausch und elektronischer Anregung