

Mikrowellenspektroskopie

aus Wikipedia, der freien Enzyklopädie

Die **Mikrowellenspektroskopie** bzw. (**reine**) **Rotationspektroskopie** ist ein zur Gruppe der Molekül- und Hochfrequenzspektroskopie gehörende Untersuchungsmethode. Sie dient vorzugsweise der Untersuchung von Gasen, Flüssigkeiten und Festkörpern. Grundlage der Methode ist die Absorption von elektromagnetischen Wellen im Frequenzbereich von ca. 0,5–100 GHz (Mikrowellen) durch die Anregung von Molekülrotationen oder zu Übergängen zwischen Hyperfeinstruktur von Atomen. Die Mikrowellenspektroskopie kann sowohl zeit- oder frequenz aufgelöst angewandt werden.

Theoretisch wird das Rotationspektrum durch den starren Rotator beschrieben. In die Beschreibung des starren Rotators kann die Zentrifugalverzerrung (Verzerrung aufgrund der Zentrifugalkraft) in Form des Zentrifugaldehnungsterms mit der Zentrifugaldehnungskonstante aufgenommen werden. Im Hinblick auf die Beschreibung werden Moleküle in lineare Kreisel, sphärische Kreisel, symmetrische Kreisel und asymmetrische Kreisel unterteilt. Rotationspektren werden meist als Absorptionsspektren beobachtet.

Inhaltsverzeichnis

- 1 Starrer Rotator
- 2 Experimentelle Voraussetzungen
- 3 Probenform
- 4 Anwendung
- 5 Literatur

Starrer Rotator

Im einfachsten Fall kann die Rotation eines Moleküles durch einen starren Rotator mit seiner Rotationsenergie

$$E_{\text{rot}} = \frac{|\vec{L}|^2}{2I} = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I} =: hc \cdot BJ(J+1)$$

beschrieben werden. Dabei ist I das Trägheitsmoment um die Rotationsachse und $B = \frac{\hbar^2}{2Ihc}$ die

Rotationskonstante. Dadurch ergibt sich das nebenstehende Bild. Im Fall des symmetrischen Kreisels stimmen die Trägheitsmomente um alle drei Hauptträgheitsachsen überein.

Experimentelle Voraussetzungen

Allgemein eignen sich nur Moleküle zur Mikrowellenspektroskopie, die Dipole bilden oder Schwingungen ausführen, bei denen sich das Dipolmoment verändert. Als Messverfahren kann zum einen bei verschiedenen Frequenzen die Absorption gemessen werden, oder man bedient sich der Fouriertransformation und wertet eine

zeitabhängige Absorption nach den darin enthaltenen Frequenzen aus.

Um exakte bzw. möglichst eindeutig zuzuordnende Absorptionsspektren zu erhalten, muss die Wechselwirkung der Moleküle untereinander minimiert werden. Meistens wird deswegen mit geringen Mengen gasförmiger Spezies gearbeitet in großen evakuierten Messbehältern.

Probenform

Mikrowellenspektren von Gasen zeichnen sich durch scharfe Absorptionslinien aus, deren Ursache meist in der Rotation von dipolbehafteten Molekülen liegt. Die scharfen Linien ergeben sich aus der Energiedifferenz quantenmechanisch festgelegter Energieniveaus von Molekülschwingungen beziehungsweise Rotationen.

Die Mikrowellenspektroskopie kann auch zur Aufklärung von Struktur und Dynamik von Flüssigkeiten genutzt werden. Die Spektren von Flüssigkeiten zeichnen sich gegenüber anderen durch sehr breite Absorptionsbanden aus, die durch mehrere Frequenzbereiche gehen. Im Mikrowellenspektrum liefern Moleküle einen Beitrag, die ein Dipolmoment aufweisen. Die Stärke des Dipolmoments geht vorzugsweise in die Stärke der Absorption ein, wogegen die Geschwindigkeit der Molekülbewegung (Taumelrotation) die Lage der Absorptionsbande auf der Frequenzskala bestimmt. Man findet im Allgemeinen einen Zusammenhang zwischen der Viskosität einer Flüssigkeit und der Bewegungsgeschwindigkeit der Dipole.

Üblicherweise lassen sich Mikrowellenspektren mit einer Überlagerung von Debye-Funktionen (benannt nach Peter Debye) beschreiben, wobei jeder einzelnen Debye-Funktion ein Bewegungsvorgang zugeordnet wird.

Anwendung

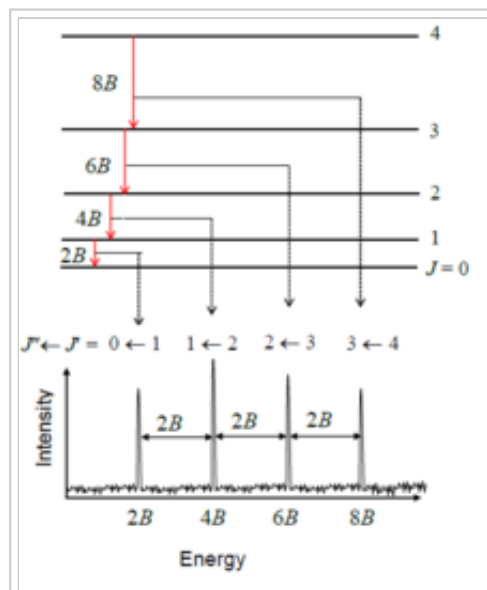
Mit Hilfe der Mikrowellenspektroskopie von Gasen können Informationen gewonnen werden, wie z. B.:

- Bindungslängen in einfach aufgebauten Molekülen
- Konformationen bestimmter chemischer Verbindungen, die sog. *Rotationshyperfeinstrukturen* im Absorptionsspektrum aufweisen,
- Strukturen kurzlebiger, nicht isolierbarer Spezies, die ebenfalls *Rotationshyperfeinstrukturen* ergeben, mit Hilfe der Molekularstrahl-Methode,
- elektronische Umgebung bzw. Elektronendichte-Verteilung um bestimmte Atomkerne herum, die sog. *Quadrupolhyperfeinstrukturen* im Absorptionsspektrum aufweisen.

Die Mikrowellenspektroskopie wird hauptsächlich in der Physikalischen Chemie eingesetzt zur Erforschung von Moleküleigenschaften, die über andere Methoden gar nicht oder nur schwer zu erlangen sind.

Literatur

- Wolfgang Demtröder: *Molekülphysik: Theoretische Grundlagen und experimentelle Methoden*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 24. August 2003, ISBN 978-3-486-24974-3, S. 362–366.



Energie-Niveaus und Emissionswellenzahlen nach dem Modell des linearen starren Rotators.

Von „<https://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Mikrowellenspektroskopie&oldid=131353679>“

Kategorie: Molekülspektroskopie

- Diese Seite wurde zuletzt am 16. Juni 2014 um 16:05 Uhr geändert.
- Abrufstatistik

Der Text ist unter der Lizenz „Creative Commons Attribution/Share Alike“ verfügbar; Informationen zu den Urhebern und zum Lizenzstatus eingebundener Mediendateien (etwa Bilder oder Videos) können im Regelfall durch Anklicken dieser abgerufen werden. Möglicherweise unterliegen die Inhalte jeweils zusätzlichen Bedingungen. Durch die Nutzung dieser Website erklären Sie sich mit den Nutzungsbedingungen und der Datenschutzrichtlinie einverstanden.

Wikipedia® ist eine eingetragene Marke der Wikimedia Foundation Inc.