

3 Moleküle – Spektroskopie und Strukturen

Manfred Fink

3.1 Einleitung

Dieses Kapitel befasst sich mit freien Molekülen und wie diese mit Photonen im Frequenzbereich von 10^9 bis 10^{19} Hz und Teilchen mit Energien von 10^{-5} eV bis 10^8 eV wechselwirken. Die Moleküle können sowohl im Grundzustand als auch in einem wohldefinierten angeregten Zustand sein. Die Motivation für diese Studien sind die statischen Eigenschaften der Moleküle, geometrische Strukturen, Elektronendichteverteilungen, aktive Gruppen und elektrostatische Potentiale und das dynamische Verhalten in Wechselwirkungsprozessen, insbesondere während chemischer Reaktionen.

Da die Schrödinger-Gleichung heute unbestritten die Grundlage der mathematischen Beschreibung der Moleküle ist, werden in der Praxis die meisten Messungen von detaillierten quantenchemischen Berechnungen begleitet. In Kapitel 3 werden jedoch vor allem die Messmethoden, Apparaturen und Verarbeitung der Messdaten beschrieben. In einigen Abschnitten werden Verfahren und Näherungen quantenmechanischer Rechnungen vorgestellt und theoretische Ergebnisse mit den experimentellen Methoden und Daten kritisch verglichen, um so unser Verständnis von Molekülen weiter zu vertiefen.

Viele analytische Methoden wurden entwickelt, um in Molekülen die geometrischen Anordnungen der Atome (Strukturen), die Eigenzustände und ihre Entartungsgrade sowie die Reaktionsdynamik mit weiteren Molekülen zu erforschen. Mit dem Einsatz von extrem monochromatischen, abstimmbaren Lasern hat die Datenfülle ein Ausmaß erreicht, dass es fast unmöglich ist, die neuen Erkenntnisse routinemäßig in das Standardwissen einzubauen. Diese präzisen Photonen (in Zeit und Energie) werden nicht nur benutzt, um die Moleküle spektroskopisch abzutasten, sondern es ist auch damit möglich, alle Moleküle im Strahlungsfeld in den gleichen Quantenzustand zu pumpen. So werden ideale Bedingungen geschaffen für das Studium von Reaktionen mit angeregten Teilchen, deren Dynamik und dominierende Wechselwirkungen. Zum Beispiel erlaubt der Zugang zu individuell ausgewählten hohen Schwingungszuständen Untersuchungen von Molekülen unter exotischen „Bewegungsabläufen“, analog zu den Studien von Atomen in hohen Rydberg-Zuständen.

Es ist im Prinzip möglich, die gesamte molekulare Welt theoretisch zu erfassen, da wir alle Beiträge im „Hamiltonian“ (dem Hamilton-Operator), der in die Dirac-Gleichung eingeht, kennen. Somit kann man Lösungen erwarten, welche alle Quantenzustände mittels antisymmetrischer Wellenfunktionen korrekt beschreiben, und somit ermöglichen, jedes nur denkbare Molekül individuell auf seine Eigenschaften abzufragen.