GRUNDERNA FÖR MOLEKYLÄR SPEKTROMETRI

Rapport B???
Institutionen för fysikalisk kemi
Åbo Akademi
2001

FÖRORD

Detta kompendium utgör en grundkurs i molekylär spektrometri för kemister. De teoretiska grunderna för de olika spektroskopigrenarna tas upp. Antalet variationer på temat spektrometriska mätmetoder är oändligt. En genomgång av samtliga metoderna och tillämpningsmöjligheterna är fullkomligt omöjlig. De bakomliggande fysikaliska processerna är dock tämligen enkla. En förståelse av de grundläggande fysikaliska principerna ger spektroskopisten färdigheten att förstå alla de olika mätmetoderna.

I föreläsningskursen ”Grunderna för spektrometri” ingår ett antal laborationer och demonstrationer, som skall inviga eleverna i de mera praktiska aspekterna av spektrometrin.

Materialet i detta kompendium är stundom något avancerat och förutsätter att eleverna är förtrogna med de grundläggande metoderna i kvantkemin. Dylika färdigheter ges i kursen “Grunderna för molekylmodellering”. Trots detta hoppas jag att även studerandena i experimentell spektrometri skulle kunna dra nytta av det aktuella kompendiet — en spektrokopist måste ju ändå vara bevandrad i de teoretiska aspekterna.

Förslag och rättelser beträffande såväl det i kompendiet befintliga materialet som eventuella kompletteringar tas emot med tacksamhet.

Åbo, september 2001
Matti Hotokka

INNEHÅLLSFÖRTECKNING

I. **Grundbegrepp** I-1.

I.1. Vad är spektrometri? I-2.
I.2. Kvantkemins grunder I-4.
I.3. Elektronisk excitation. Jonisering I-9.
I.4. Impulsmoment I-11.
I.5. Potentialenergikurva I-14.
I.6. Energienheter i spektrometrin I-16.
I.7. Elektromagnetisk strålning I-19.

II. **Elektroniska spektra** II-1.

II.1. Spektrets ursprung II-2.
II.2. Vilka metoder? II-6.
II.3. Beer-Lamberts lag II-7.
II.4. Karakteristiska övergångar i UV-vis II-9.
II.5. Kromoforer II-12.
II.6. Övergångsmetallernas spektra II-13.
II.7. Franck-Condon principen II-16.
II.8. Spektrallinjernas form II-18.
II.9. UV-vis spektrometer II-21.
II.10. Laboratorietekniker II-23.
II.11. Relaxation II-28.
II.12. Fluorescens och fosforescens II-30.
II.13. Fotoelektronspektroskopi II-33.
II.14. XPS (ESCA) II-36.
II.15. Auger spektrometri II-39.

III. **Vibrationspektroskopi** III-1.

III.1. Separering av rotationerna och vibrationerna III-2.
III.2. Harmonisk oscillator III-8.
III.3. Anharmonisk oscillator III-11.
III.4. Populationerna III-14.
III.5. Frihetsgraderna III-16.
III.6. Normalkoordinater III-17.
III.7. Gruppvibrationer III-21.
III.8. Vad observeras III-26.
III.9. Mättekniker III-29.
III.10. Dispersiv IR III-30.
III.11. FT-IR III-32.
III.12. Near Infrared (NIR) III-36.

III.13. Raman-effekt III-37.
III.14. Experimentella metoder III-42.

IV. **Rotationspektroskopi** IV-1.

IV.1. Rotationsrörelse IV-2.
IV.2. Rena rotationspektra IV-4.
IV.3. Klassificering av molekyler IV-6.
IV.4. Populationerna IV-7.
IV.5. Rotations-vibrationsspektroskopi IV-8.

V. **Inledning i optik** V-1.

V. INLEDNING I OPTIK V-1.
V.1. Ljus V-2.
V.2. Polarisering V-5.
V.3. Brytningsindex V-6.
V.4. Geometrisk optik V-12.

VI. **NMR** VI-1.

VI.1. Impulsmoment VI-2.
VI.2. Spinnimpulsmoment VI-4.
VI.3. Magnetiskt moment. Zeemann-effekt VI-5.
VI.4. Spektroskopiska övergångar VI-8.
VI.5. Kemisk förskjutning VI-10.
VI.6. Kopplingskonstanter VI-15.
VI.7. Kopplingsmönster VI-17.
VI.8. Ekvivalenta kärnor VI-20.
VI.9. Kemiska tillämpningar av kopplingen VI-21.
VI.10. Klassificering av spektra VI-22.
VI.11. AX och AB spektra VI-24.
VI.12. AX_2 system VI-25.
VI.13. AB_2 system VI-26.
VI.14. AMX system VI-27.
VI.15. ABX system VI-28.
VI.16. Relaxation VI-29.
VI.17. Relaxationsmekanismer VI-32.
VI.18. FT-NMR VI-33.
VI.19. 2-D NMR VI-36.
VI.20. Dubbelresonanstekniker VI-40.
VI.21. Kvadrupolväxelverkan VI-41.
VI.22. Elektronspinnresonansspektrometri (ESR) VI-42.

VII. **Masspektrometri** VII-1.

VII.1. Grundprincip VII-2.
VII.2. Masspektrometerns funktion VII-4.
VII.3. Molekyljonen VII-8.
VII.4. Fragment VII-9.
VII.5. Fragmenteringsmekanismer VII-10.
VII.6. Spektralanalys VII-12.
VII.7. Typiska fragmenteringsreaktioner VII-16.
VII.8. Jonisering VII-18.
VII.9. Reaktionsmekanismer VII-20.

VIII. **Övriga metoder** VIII-1.

VIII.1. Ljus VIII-2.
VIII.2. Optisk rotation VIII-5.
VIII.3. Cirkulär dikroism spektrometri VIII-7.
VIII.4. Ellipsometri VIII-9.
VIII.5. Diffraktion VIII-10.