

1 Einführung

Physik ist die Wissenschaft über Struktur und Eigenschaften der unbelebten Materie. Molekülphysik ist ein Teilgebiet der Physik, das die Struktur und die Eigenschaften von Molekülen mit physikalischen Methoden untersucht.

Lat. *moles* = Masse, *molecula* = kleine Masse

Ein Molekül besteht aus zwei oder mehreren gleichen oder verschiedenartigen Atomen, die durch eine chemische Bindung zusammengehalten werden, und ist damit die kleinste Einheit eines (nichtatomaren) chemischen Stoffes.

Bindungsenergie (96 kJ pro mol \approx 1 eV pro Molekül):

- chemische Bindungen: Dissoziationsenergien von 300 kJ mol⁻¹ – 2000 kJ mol⁻¹,
- zwischenmolekulare Wechselwirkungen in Flüssigkeiten, Molekulkristallen und Molekülen physisorbiert an Festkörperoberflächen in der Größenordnung von 50 kJ mol⁻¹. Bei Gasen geht Wechselwirkungsenergie mit geringer werdendem Druck gegen null.

Die Bearbeitung von Problemen der Molekülphysik stützt sich auf drei Säulen:

- Auswertung des Erfahrungsschatzes der Chemie aus der Betrachtung von Stoffwandlungen, Synthesen und Analysen.
- Aussagen der Quantenmechanik (Quantenchemie) zur Erklärung molekularer Strukturen und Eigenschaften,
- physikalische Messtechnik und Messmethodik.

Der Vorlesungsaufbau ist anders gegliedert: Diesem Kapitel Einführung folgen die Kapitel

2. Größe und Kinetik der Moleküle,
3. Moleküle in elektrischen und magnetischen Feldern,
4. Einige Grundlagen zur Struktur und Symmetrie,
5. Theorie der chemischen Bindung,
6. Makromoleküle,
7. Molekulare Elektronik,
8. Molekülspektroskopie

Theoretische Grundlagen bieten die Kapitel 3-5, Untersuchungsmethoden werden in Kapiteln 2 und 8 beschrieben, Kapitel 6 und 7 behandeln thematische Aspekte. Für das Kapitel 8 werden Teile des Skripts für die Vorlesung "Spektroskopie für Physiker" verwendet.

Anliegen bei dieser Auswahl des Vorlesungsstoffs ist eine Betonung der Sicht des Physikers auf die Molekülphysik, bzw. Atomphysik. (Teile der Atomphysik müssen eingeschlossen werden, da eine solche Vorlesung im Kurs Struktur der Materie I nicht extra gelesen wird.) Ähnliche Themen gehören auch zur Astrophysik, Chemie, Biologie, Materialwissenschaften und Technik, darunter auch Umwelttechnik bzw. Umweltphysik, werden dort aber meist (Ausnahme: Physikalische Chemie) unter anderer Sicht dargestellt.

Die Geschichte der Molekülphysik kann man bei Demokrit (Δεμοκρίτος, Democritus, 460-371 v. Chr.) beginnen, der eine atomare Philosophie begründete. Das haben später Epikur (Ἐπικούροσ, Epicurius) und Lukrez (Titus Carus Lucretius) unterstützt. Da es aber von Aristoteles (Ἀριστοτελεσ, Aristotle, 384-322 v. Chr.) verbannt worden war, blieb es bis zum Mittelalter unbekannt und wurde erst von Galileo Galilei (1564-1642) wieder ausgegraben. Danach postulierten Robert Boyle, Isaac Newton und Christian Huygens den Atomismus der Materie, Gottfried Wilhelm Leibniz negierte ihn und Daniel Bernoulli verwendete ihn als Grundlage bei der Begründung der kinetischen Theorie der Gase.

Quantitative Betrachtungen chemischer Reaktionen führten zu dem Gesetz der konstanten und multiplen Proportionen, das John Dalton in seinem 1808 erschienen Buch begründet hatte. Im gleichen Jahr fand Louis Joseph Gay-Lussac bemerkenswerte Volumenverhältnisse bei Gasreaktionen, die sich mit Daltons Gesetz nicht erklären ließen.



Eine endgültige bis heute beständige Lösung fand 1811 der italienische Physiker Avogadro (Lorenzo Romano Amedeo Carlo, Graf von Quaregna und Ceretto, 1776-1856), siehe Bild links. Das Avogadro'sche Gesetz sagt, dass gleiche Volumina idealer Gase bei gleichem Druck und gleicher Temperatur die gleiche Anzahl atomarer Gruppen enthalten. Avogadro bezeichnete diese erstmals als "molecula". Damit hat er eine wichtige Grundlage für die Atomphysik und Molekülphysik geschaffen, die jedoch noch etwa ein halbes Jahrhundert bis zu ihrer allgemeinen Anerkennung brauchte.

Als Avogadro-Konstante wird ihm zu Ehren die Zahl der Moleküle in einem Mol bezeichnet, die 1865 erstmals von Joseph Loschmidt bestimmt worden war, und gegenwärtig folgenden Wert hat:

$$L = N_A = 6,0221415(10) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}.$$

Mit der ersten Abschätzung dieser Zahl hatte Loschmidt auch den Moleküldurchmesser abgeschätzt.

Mit den Fortschritten in Atom- und Quantenphysik ist das exakte Verständnis der chemischen Bindung möglich geworden. Der Physiker Walter (Ludwig Julius Paschen Heinrich) Kossel entwickelte 1915 ein elektrostatisches Modell der heteropolaren chemischen Bindung (Ionenbeziehung). Als Ursache der Polarität wurde die Elektronegativität der Atome erkannt. Der Physikochemiker Gilbert Newton Lewis veröffentlichte 1916 eine Arbeit über die chemische homöopolare Bindung durch Bildung eines Elektronenpaares. (1938/39 Säure-Base-Theorie).

Seit 1927 wurden von den Physikern Friedrich Hund, Walter Heinrich Heitler und Fritz Wolfgang London wesentliche Grundlagen für die Quantentheorie der chemischen Bindung gelegt, die jetzt als Quantenchemie Teilgebiet der Chemie geworden sind.

Literatur für die Vorlesung Molekülphysik

H. Haken und H.C. Wolf: Atom- und Quantenphysik, 8 Aufl. Springer 2004, 531 S. 336 Abb., 177 Aufgaben und vollständigen Lösungen. ISBN3-540-02621-5

H. Haken und H.C. Wolf: Molekülphysik und Quantenchemie, 4. Aufl. 2003, 528 S. 306 Abb., 133 Aufgaben. Vollständige Lösungen im Internet. ISBN 3-540-43551-4

H. Haken and H.C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, 6th rev. and enlarged ed. 2000, 503 pp. 287 figs., 29 tabs., 173 problems and solutions. Hardcover ISBN 3-540-67274-5

H. Haken and H.C. Wolf: Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, Springer 2004, ISBN 3-540-40792-8

W. Demtröder: Experimentalphysik 3, Atome Moleküle und Festkörper, 2. Aufl., Springer 2000, ISBN 3-540-66790-3

H. Budzikiewicz: Massenspektrometrie - Eine Einführung John Wiley & Sons Inc; (October 4, 2004)

Peter W. Atkins und Julio de Paula,.: Physikalische Chemie, 4. Auflage, 2006, Wiley-VCH, ISBN 3-527-31546-2

T. Baché, W.E. Moerner, M. Orrit, U.P. Wild (eds.): Single-Molecule Optical Detection, Imaging and Spectroscopy, VCH 1997, ISBN 3-527-29316-7

M. Born: Optik, Springer 1972

Vorlesungsskripte sind abrufbar unter

www.grenzflaechenphysik.de → Prof. Dr. Dieter Freude → lectures → Molekülphysik
oder

www.dieter-freude.de → Vorlesungsskripte → Molekülphysik

E-mail-Adresse des Vorlesenden

freude@uni-leipzig.de

Anforderung zur Zusendung von Übungsaufgaben

mit Angabe von Name, Vorname, Matrikelnummer, Studiengang, Studienjahr an obige E-mail-Adresse schicken