

1) Welche Beobachtungen in physikalisch spektroskopischen Experimenten gaben den Anlass zur Entwicklung der Quantenmechanik?

Hinweis: Rutherfordsches Atommodell (Widerspruch?) - Bohrsches Atommodell

2) Beschreiben sie das Modell des Teilchens im 1D Kasten.

-Definieren sie die Randbedingungen

- Beschreiben sie die Energielage auf der Grundlage der Quantenmechanik

- Welche Lösungen gibt es für die resultierende Differentialgleichung

- Welche Konsequenzen hat die Lösung

3) Die 4 Quantenzahlen beschreiben den elektronischen Zustand eines Atom/Ions, i.e. eines Vielelektronensystems, der durch das Termsymbol wiedergegeben wird. Wie lautet das Termsymbol für

$\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{Cu}^{1+}$ ,  $\text{Mn}^{7+}$ ?

4) Was versteht man unter der Russel-Saunders-Kopplung?

5) Welche Eigenschaft eines Elements bestimmt die NMR-Spektroskopie? Zeigen sie dies am Beispiel des Wasserstoffs.

6) In welchem Energiefenster liegen die kernmagnetischen Niveaus ohne angelegtes Magnetfeld? Wie hoch ist größenordnungsmäßig der Quotient der Besetzungswahrscheinlichkeit zwischen Grund- und angeregtem Energieniveau? die

7) Skizzieren sie am Beispiel eines 1-Pulsexperiments den Ablauf eines NMR-Experiments (Vektordiagramm). Ausgangszustand - Anregung(RF-Puls) - Wiedereinstellung des Gleichgewichts.

8) Was versteht man unter der chemischen Verschiebung?

9) Erläutern sie am Beispiel der mineralischen Silikatkristallographie den Einfluß der chemischen Verschiebung auf die  $^{29}\text{Si}$  NMR Spektren.

10) Was unterscheidet NMR- von der ESR-Spektroskopie?

11) Welche stoffliche Größe erfasst man mit der Schwingungsspektroskopie?

12) Welche unterschiedlichen Experimente nutzt man zur Anregung von Schwingungsspektren? Erläutern sie das Anregungsprinzip.

- 13) Welches Energiefenster deckt die Schwingungsspektroskopie ab?
- 14) Wasser in Mineralen kann durch Schwingungsspektroskopie gut nachgewiesen werden. Welche Schwingungsmode wird dazu bevorzugt ausgewertet und wie zeigt sich diese Baugruppe im Schwingungsspektrum?
- 15) Was versteht man unter den "Schwingungsfreiheitsgraden" und wie wirkt sich Symmetrie auf diese aus?