

NaCl : $a_0 = 564 \text{ pm}$

$2\theta = 93,8^\circ$ (420 Reflex)

$\lambda = 2d \sin \theta$

$d = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

$d_{420} = \frac{564 \text{ pm}}{\sqrt{20}}$

$= 126 \text{ pm}$

$\lambda = 184 \text{ pm}$

1.6 Röntgenbeugung in der Chemie

→ Atompositionen

→ $\rho(\vec{r})$ Elektronendichteverteilung

↳ Elementen im Raum abzug

→ Kupfer sulfat Kristalle (N. von Lawrence)

NaCl und KCl Kristalle (Bragg)

→ 1950-er Jahre: DNA Entschlüsselung

Netzebenen: $d \approx 3 \text{ \AA}$ → $2\theta \approx 30^\circ$

$$\lambda = 150 \text{ pm}$$

$2\theta \approx 1^\circ$ → Röntgenkleinwinkelstreuung
(SAXS)

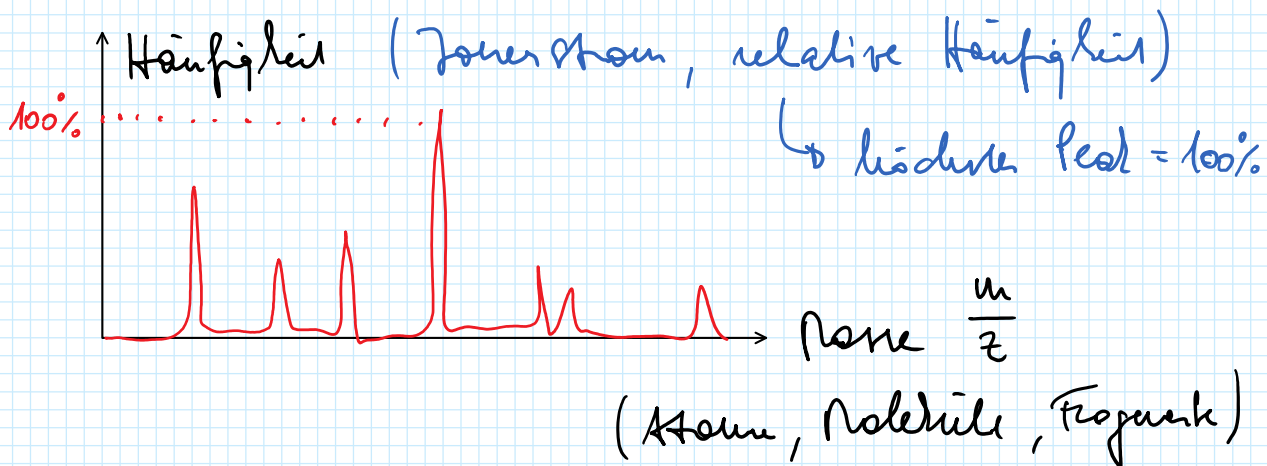
② Nerrenspektroskopie

2.1 Grundlagen

Analyse der massenspezifischen
Zusammensetzung

→ Elementzusammensetzung

→ Isotope (charakteristische Verfälle)



- Anforderungen: 1) Gasphase
2) ionisierte Teilchen



Obergrenze der Noheliummasse

Prinzip

elektrostatische Kraft $\vec{F} = \vec{E} \cdot q$

Korrekturekraft: $\vec{F}_L = q (\vec{v} \times \vec{B})$

$m \ddot{r} = \vec{F} = \vec{E} \cdot q$

$\ddot{r} = \frac{q}{m} \vec{E}$

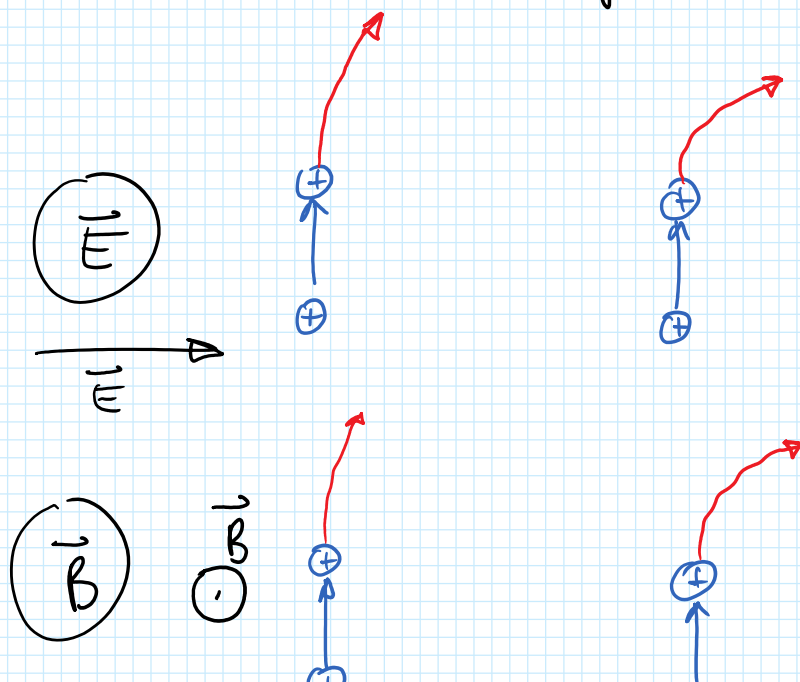
$m \ddot{r} = q (\vec{v} \times \vec{B})$

$\ddot{r} = \frac{q}{m} (\vec{v} \times \vec{B})$

$\ddot{r} \sim \frac{q}{m}$

kleines $\frac{q}{m}$

großes $\frac{q}{m}$

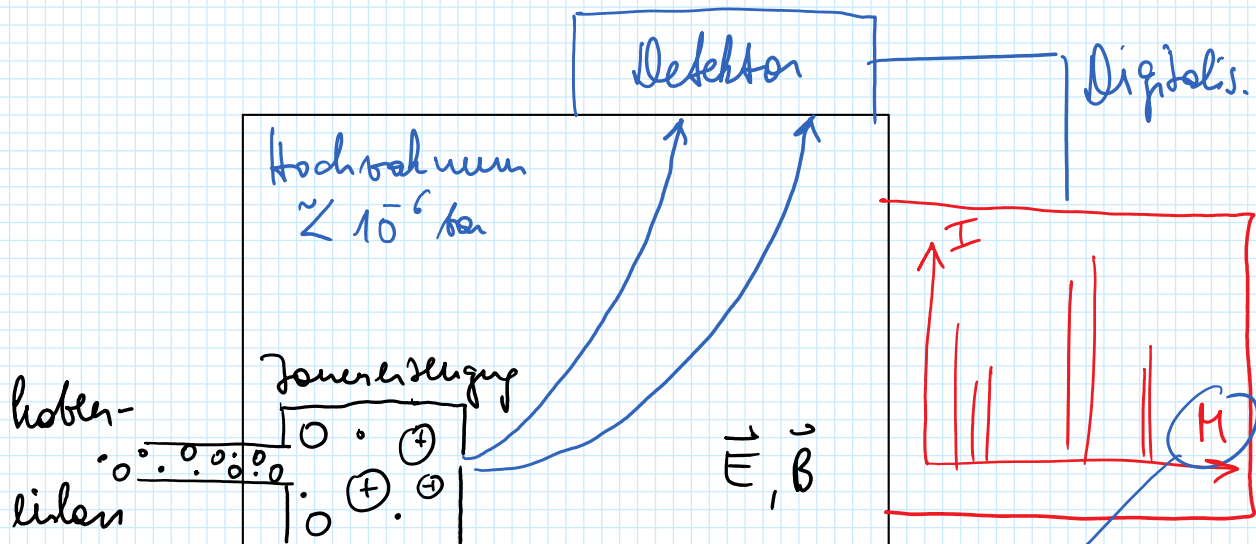


U



großes $\rho_{\text{Molekül}}$

kleines $\rho_{\text{Molekül}}$



$\frac{m}{z}$

(Nenn-m-Ladung)

$$\left[\frac{m}{z} \right] = u$$

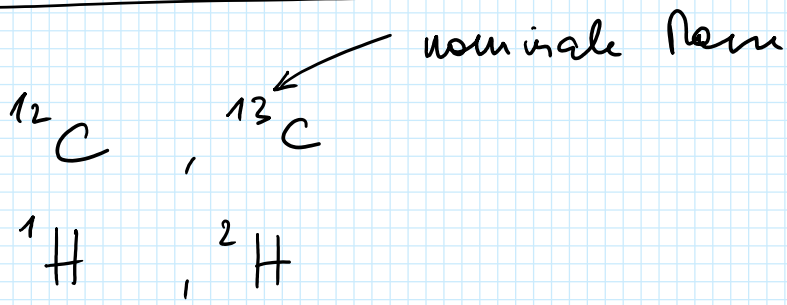
$$\left(\frac{u}{e} \right)$$

$$1u = \frac{1}{12} m_{12C}$$

$$= 1,66059 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

2.2 Protoperiode

^{12}C , ^{13}C ← nominale Norm



Molmasse : gewichtliches Mittel aller Isotope

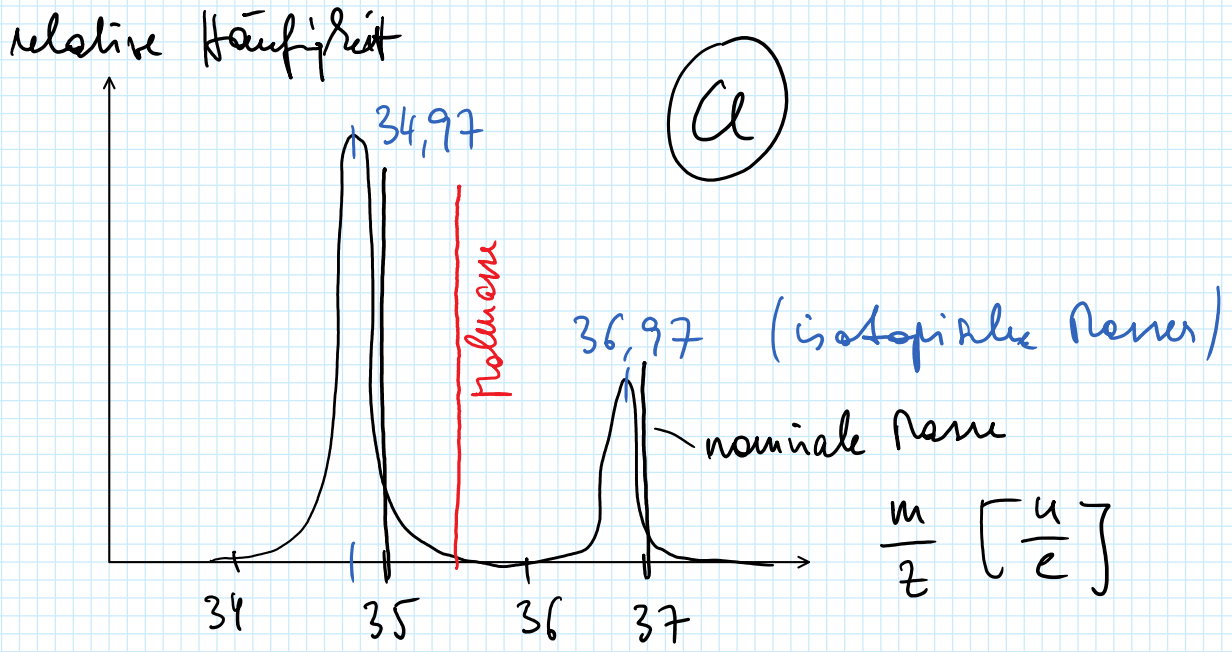
Isotopische Masse : Masse eines Isotops

$^{12}\text{C} \rightarrow m = 12\text{u}$

$^{13}\text{C} \rightarrow m = 13,003355\text{u}$

Neutron $m = 1,008665\text{u}$

Nominale Masse : gemittelt gewichtet nach der Häufigkeit des häufigsten Isotops



$^{35}\text{Cl} : \approx 76\%$
 $^{37}\text{Cl} : \dots$

→ Molmasse : 35,45 u

$\text{Cl} : \approx 76\%$ \rightarrow Molmasse: 35,45 u
 $^{37}\text{Cl} : \approx 24\%$

mono-isotopische Elemente (X-Element)

$^{19}\text{F}, ^{23}\text{Na}, ^{31}\text{P}, ^{127}\text{I}$

poly-isotopische Elemente (mind. 2 Isotope)

X+1 : $^{12}\text{C}, ^{13}\text{C}$

$^1\text{H}, ^2\text{H}$

$^{14}\text{N}, ^{15}\text{N}$

X+2 : $^{35}\text{Cl}, ^{37}\text{Cl}$

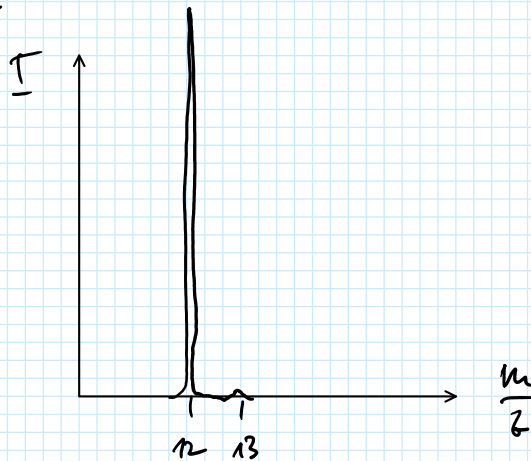
$^{79}\text{Br}, ^{81}\text{Br}$

Isotopenverteilung : C_n

$^{12}\text{C} : 98,9\%$

$^{13}\text{C} : 1,1\%$

C_n : X+1 $\Rightarrow 1,1\%$

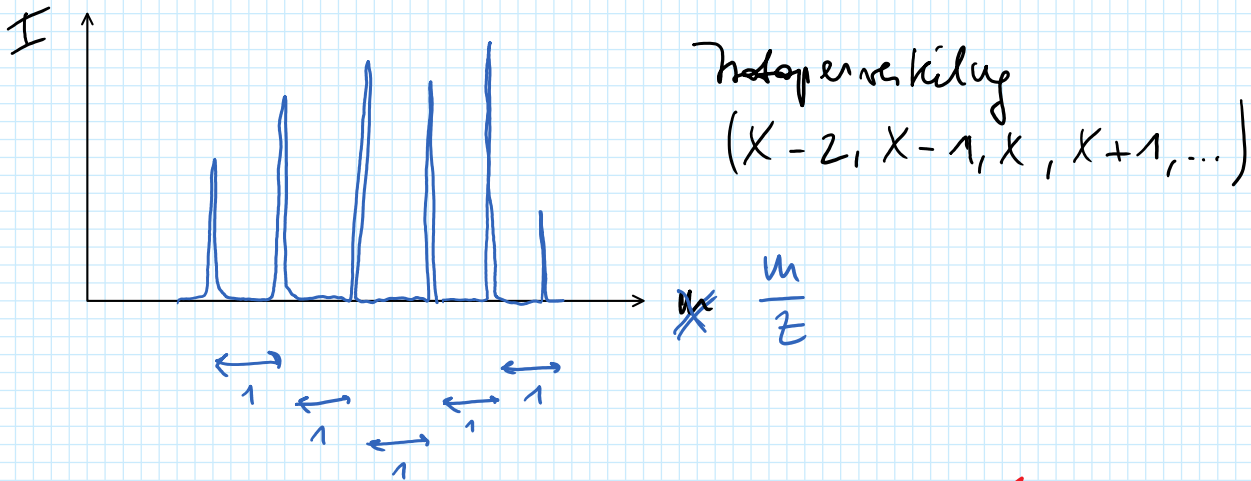


C_{20} : X+1 $\Rightarrow 22\%$

\rightarrow charakteristische Isotopenverteilung!

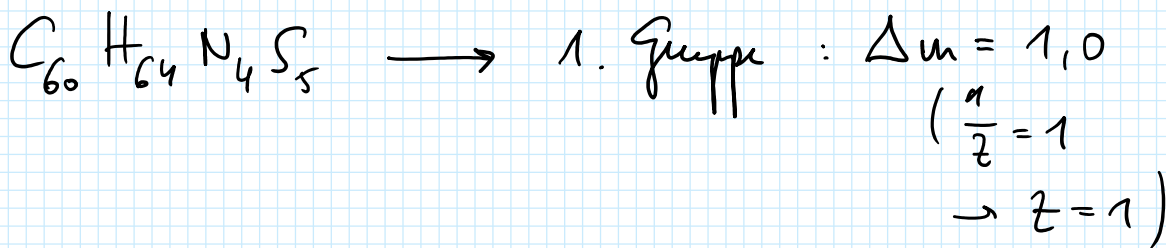
(nominale Masse lsg. nicht mehr
Richtbar)

Belastung gladere Ionen



$$\Delta m (\text{Abstand}) = \frac{m_2}{z} - \frac{m_1}{z} = \frac{m_2 - m_1}{z} = 1$$

$$\Delta m = \frac{1}{z}$$



2. Gruppe : $\Delta m = 0,5$
($\frac{1}{z} = 0,5$
 $\rightarrow z = 2$)

3. Gruppe : $\Delta m = 0,33$
($\frac{1}{z} = 0,33$)

→ $z=3$)

⇒ Ladungszustand wird
in Tropenrekulung klar!