

Lehrveranstaltung Teil Optische Spektroskopie

Starke Zusammenhang mit Teil Optische Spektroskopie

5 Optik

5.1 Allgemeine Eigenschaften des Lichtes

5.1.1 Modellvorstellungen

Wellen- und Korpuskular-Beschreibung des Lichtes

5.1.2 Lichtgeschwindigkeit

Ausbreitungsgeschwindigkeit, Wert für Vakuum; Zusammenhang mit der Brechzahl der Materie; Zusammenhang von Ausbreitungsgeschwindigkeit, Frequenz und Wellenlänge; Abhängigkeit dieser Größen vom Medium; Definition der Wellenzahl

5.1.3 Spektralbereiche

Spektrum elektromagnetischer Strahlung, sichtbarer Spektralbereich, ungefähre Wellenlängen

5.1.4 Quantenstrahlung

Zusammenhang von Quantenenergie und Frequenz; Photoeffekt (Grundzüge); Ionisation (Grundzüge)

5.1.5 Lambert-Beer'sches Gesetz (s.a. PhAna 12.7.3)

Quantitativ; Absorption [gemäß Arzneibuch $A = \lg(I_0/I)$], Abhängigkeit von Schichtdicke und Konzentration; Halbwertdicke; Begriff der Transmission

5.1.6 Quadratisches Abstandsgesetz

Abnahme der Strahlungsflussdichte mit wachsendem Abstand von einer punktförmigen Quelle

5.2 Geometrische Optik**5.2.1 Lichtbündel**

Parallelbündel, Erzeugung mittels Blende und Linse; divergentes und konvergentes Bündel

5.2.2 Reflexion und Brechung

Reflexionsgesetz, geometrische Zusammenhänge; Brechungsgesetz, Brechzahl (Messung s. PhAna 12.2.1); Dispersion; Totalreflexion, Bedingungen des Auftretens, z.B. Lichtleiter

5.2.3 Spiegel

Abbildung am ebenen Spiegel und am sphärischen Hohlspiegel

5.2.4 Linsen

Sammel- und Zerstreuungslinsen, Abbildung mit (dünnen) Linsen, Bildkonstruktion, Abbildungsformel, Verhältnis Bildgröße zu Gegenstandsgröße; Linsensysteme aus zwei dicht zusammengefügt dünnen Linsen; Brechwert und Brennweite

5.3 Optische Einrichtungen und Systeme**5.3.1 Vergrößerung**

Winkelvergrößerung, Sehwinkel, (konventionelle) deutliche Sehweite

5.3.2 Lupe

Strahlengang, Vergrößerung

5.3.3 Lichtmikroskop

Funktion des Objektivs und des Okulars, Zusammenhang von Vergrößerung und Brennweiten von Objektiv und Okular; Okularmikrometer, Eichung mittels Objektmikrometer; Auflösungsvermögen, qualitative Abhängigkeit von Wellenlänge, Apertur und Immersionsfähigkeit

5.3.4 Spektralapparat (s.a. PhAna 12.5.2)

Prismen- und Gitterspektrometer, Aufbau und Strahlengang (s.a. 5.3.5); Handhabung für die Spektralanalyse (Eichung, Vergleichsmessungen)

5.3.5 Monochromatoren

Spektralfilter; Prismen- und Gittergeräte (vereinfachtes Schema) für ultraviolettes, sichtbares und infrarotes Licht (s.a. 5.1.3, 5.3.4)

5.4 Polarisierung des Lichtes

5.4.1 Grundlagen

Unpolarisiertes und linear polarisiertes Licht, Unterschied, Beispiele

5.4.2 Polarisierungseffekte

Brechung und Reflexion, Brewster'sches Gesetz; Grundzüge von Dichroismus, Streupolarisation und Doppelbrechung; Anwendung von Polarisationsfolien

5.4.3 Optische Drehung (s.a. PhAna 12.3)

Abhängigkeit zwischen Drehung der Polarisierungsebene sowie Konzentration des Stoffes, Art des Lösungsmittels, Temperatur, Lichtweglänge und Wellenlänge des Lichtes (Rotationsdispersion)

5.4.4 Polarimeter (s.a. PhAna 12.3.1)

Einfache Polarimeter, Aufbau und Wirkungsweise; Halbschattenapparat, Aufbau und Arbeitsweise

6 Schwingungen und Wellen

6.1 Allgemeines über Schwingungen

6.1.1 Darstellung

Darstellung harmonischer Schwingungsvorgänge (quantitativ, s.a. 2.1.4)

6.1.2 Schwingungsenergie

Periodischer Wechsel zwischen verschiedenen Energieformen am Beispiel Federpendel und elektrischer Schwingkreis (s.a. 2.3.2 und 4.7.4)

6.1.3 Schwingungsfähige Systeme

Eigenfrequenz von elektrischem Schwingkreis (s.a. 4.7.4) und Federpendel (s.a. 2.3.2), Resonanz schwingungsfähiger Systeme

6.1.4 Gedämpfte Schwingungen

Schematische Darstellung einfacher Einschwing- und Abklingvorgänge

6.2 Wellen

6.2.1 Ausbreitung

Zusammenhang von Ausbreitungsgeschwindigkeit, Frequenz und Wellenlänge; Abhängigkeit dieser Größen vom Medium; Definition der Wellenzahl; Ausbreitungsgeschwindigkeit elektromagnetischer Wellen im Vakuum (s.a. 5.1.2)

6.2.2 Darstellung

Raum- und Zeitdarstellung von sinusförmigen Wellen

6.2.3 Schwingungsformen

Transversale und longitudinale Wellen (schematisch); Beispiele (elektromagnetische Wellen, Schallwellen); Lichtpolarisation (s.a. 5.4.1)

6.2.4 Interferenz

Huygens'sches Prinzip; Überlagerung zweier Wellenzüge, Voraussetzung für vollständige Auslöschung; Grundzüge der Interferenz am optischen Strichgitter (s.a. 5.3.5)

7 Atomistische Struktur der Materie**7.1 Bausteine und Aggregatzustände der Materie****7.1.1 Atomare Einheiten**

Stoffmenge (Mol), atomare Masseneinheit, Avogadro-Konstante, Definition und Größenordnung

7.1.2 Thermische Bewegung

Thermische Bewegung von Atomen und Molekülen in Flüssigkeiten und Gasen; Geschwindigkeitsverteilung (qualitativ); qualitativer Zusammenhang mit der Temperatur bei Gasen; Brown'sche Bewegung

7.1.3 Kristallgitter

Einfache räumlich-periodische Anordnungen von Atomen im kubischen Gitter; Schwingungen um „Ruhelagen“ (qualitativ, s.a. 3.5.1)

7.2 Aufbau von Atomen und Molekülen (s.a. Chem 1.2)**7.2.1 Atome**

Aufbau aus Kern und Hülle; Masse und Radius von Atomen und ihren Kernen (Größenordnung)

7.2.2 Bohr'sches Atommodell

Grundzüge

7.2.3 Moleküle

Aufbau von Molekülen; Molekülschwingungen: Analogie zum Federpendel (s.a. 2.3.2), Einfluss der Substitution isotoper Nuklide (qualitativ); Molekülrotation (s.a. 2.3.5)

7.2.4 Energieniveaus und Spektren (s.a. PhAna 12.5.1)

Zusammenhang diskreter Energiestufen in Atomen mit den beobachtbaren Spektren im sichtbaren und Röntgen-Bereich; Linienspektren bei Atomen (Beispiele im Sichtbaren und bei Röntgenstrahlung); Lichtemission bei Elektronenübergängen (qualitativ); Bandenspektren bei Molekülen, Schema der Entstehung; kontinuierliche Spektren

7.2.5 Röntgenröhre

Aufbau, Betrieb und Wirkungsweise (s.a. 4.4.5); Grundzüge der Entstehung von Bremsstrahlung und charakteristischer Strahlung

7.3 Atomkerne und Kernstrahlung**7.3.1 Kerne und ihre Bausteine**

Proton, Neutron; Ladung und relative Masse, Vergleich mit Elektron; Kernladungszahl; Begriff isotoper Nuklide, einfache Beispiele

7.3.2 Kernreaktionen

Symbole zur Darstellung von Kernreaktionen; Erhaltungssätze für Ladung und Nukleonenzahl

7.3.3 Radioaktivität

Änderung von Ladung und Masse von Atomkernen in Verbindung mit α -, β - und γ -Emission, Eigenschaften von α -, β - und γ -Strahlung

7.3.4 Detektoren

Strahlungsnachweis mittels Ionisationskammer, Zählrohr, Szintillationszähler (Grundzüge)

7.3.5 Zerfallsgesetz

Definition der Aktivität; gebräuchliche Darstellungen; Halbwertszeit und mittlere Lebensdauer, Zusammenhang mit dem Zerfallsgesetz

7.3.6 Absorption energiereicher Strahlung

Durchdringungsfähigkeit von α -, β - und γ - und Neutronenstrahlung in festen Stoffen; Absorptionsgesetz für γ -Strahlung und Röntgenstrahlung in Materie, Abhängigkeit von der Wellenlänge

7.3.7 Dosimetrie

Energiedosis, Energiedosisleistung, Ionendosis; gebräuchliche Einheiten

7.3.8 Anwendungen aktiver und stabiler Nuklide

Grundzüge der Gewinnung radioaktiver Nuklide und der Anwendung radioaktiver Atome in der Chemie und bei Pharmaka, z.B.: ^{60}Co (Kobaltbestrahlungsquelle), $^{99\text{m}}\text{Tc}$ (Radiagnostik), ^{131}I (Stoffwechseluntersuchung); Tracermethode; Anwendung ionisierender Strahlung zur Sterilisierung von Verbandmaterial und Verpackungen

12 Optische und spektroskopische Verfahren

12.1 Grundlagen

12.1.1 Elektromagnetische Strahlung

Allgemeines (s. P/PC/AFL 5.1); zur Charakterisierung von Arzneistoffen wichtige Spektralbereiche, Zuordnung einzelner Spektralbereiche zu Methoden des Arzneibuches; graphische Darstellung von Spektren

12.2 Grundlagen der Refraktometrie

12.2.1 Brechzahl (Brechungsindex), Messung

Allgemeines (s. P/PC/AFL 5.2.2); Bestimmungsmethode: Grenzwinkel der Totalreflexion, Abbe-Refraktometer; Dispersion der Brechzahl (s.a. P/PC/AFL 5.2.2); Bezugswellenlängen, Bezugstemperaturen, Kalibrierung und Kontrolle von Refraktometern nach Arzneibuch; Referenzsubstanzen des Arzneibuches

12.2.2 Pharmazeutische Anwendungen, insbesondere nach Arzneibuch

Identitäts- und Reinheitsprüfungen; Charakterisierung von Stoffgemischen und Lösungen (auch in der HPLC)

12.3 Grundlagen der Polarimetrie

12.3.1 Optische Drehung, Messung

Allgemeines (s. P/PC/AFL 5.4); Chiralität (s. Chem 3.3), optische Aktivität; Abhängigkeit der Drehwerte von der Konzentration; spezifische Drehung, Definitionen nach Arzneibuch, Einfluss von Wellenlänge (Dispersion), Temperatur, Lösungsmittel; Polarimeter, Leistungsmerkmale nach Arzneibuch; Prüfung von Polarimetern nach Arzneibuch

12.3.2 Pharmazeutische Anwendungen, insbesondere nach Arzneibuch

Identitäts- und Reinheitsprüfungen, Gehaltsbestimmungen

12.4 Zirkulardichroismus

12.4.1 Grundlagen (s.a. 12.3.1)

Prinzip des Zirkulardichroismus (CD), Einfluss der Wellenlänge, CD-Spektrum

12.4.2 Anordnung

Funktionsweise von Dichrographen, Messgrößen; Apparatur nach Arzneibuch, Prüfung

12.4.3 Zusammenhang von molarem Zirkulardichroismus und molarer Elliptizität

12.4.4 Pharmazeutische Anwendungen

12.5 Grundlagen der Atomemissionsspektroskopie

12.5.1 Lichtemission von Atomen

Lichtemission durch angeregte Zustände von Atomen, Temperaturabhängigkeit bei thermischer Anregung; Emissionsspektren, Energieniveaudiagramme; Auftreten von Serien bei einfachen Atomen; Anregbarkeit pharmazeutisch relevanter Elemente

12.5.2 Messmethodik und instrumentelle Anordnung

Prinzipieller Aufbau und Funktionsweise von Spektroskopen und Spektralphotometern (s.a. P/PC/AFL 5.3.4); Flammenphotometrie und weitere Atomisierungs- und Anregungsverfahren, atomemissionsspektroskopische (einschl. flammenphotometrische) Techniken des Arzneibuches

12.5.3 Pharmazeutische Anwendungen, insbesondere nach Arzneibuch

Qualitative Analyse (Spektralanalyse, Flammenfärbung); quantitative Analyse, Kalibrierkurven (s. 1.2.3), Standardadditionsmethode (s. 1.2.4); pharmazeutisch relevante Bestimmungen

12.6 Grundlagen der Atomabsorptionsspektroskopie (AAS)

12.6.1 Lichtabsorption von Atomen

Prinzip der AAS; Absorption von Licht durch atomare Dämpfe, Resonanzlinien; Vergleich mit Emissionsvorgängen (s. 12.5.1)

12.6.2 Messmethodik und instrumentelle Anordnung

Prinzipieller Aufbau und Funktionsweise von AAS-Geräten, Anforderungen des Arzneibuches, Lichtquellen, thermische Atomisierungseinrichtungen, Hydridtechnik, Kaltdampftechnik

12.6.3 Pharmazeutische Anwendungen, insbesondere nach Arzneibuch

Qualitative und quantitative Analyse mit der AAS, Nachweis- und Erfassungsgrenzen, Selektivität; Gültigkeit des Lambert-Beer'schen Gesetzes, Störungen; Kalibrierkurve (s. 1.2.3), Standardzumischmethode (s. 1.2.4); pharmazeutisch relevante Bestimmungen

12.7 Grundlagen der Molekülspektroskopie im ultravioletten (UV) und sichtbaren (Vis) Bereich

12.7.1 Grundlagen der Lichtabsorption durch Moleküle im UV und Vis

Absorption von Licht durch Moleküle; HOMO-LUMO-Übergänge, Anregungsarten, Absorptionsbanden, Absorptionsspektren; Chromophore mit π -Elektronen, Chromophore mit π - und n-Elektronen; Jablonski-Termschema (Energieniveaudiagramm)

12.7.2 Beziehungen zwischen Molekülstruktur und Lichtabsorption

Verbindungen mit $\pi \rightarrow \pi^*$ -Übergängen, Verbindungen mit $\pi \rightarrow \pi^*$ - und $n \rightarrow \pi^*$ -Übergängen, Grundstrukturen und Absorptionsverhalten von Carbonylverbindungen, Aromaten, Polymethinen (Cyaninen, Oxonolen, Merocyaninen) und Polyenen; batho- und hypsochromer, hypo- und hyperchromer Effekt; Absorptionskoeffizienten und Struktur; Lösungsmittel, Eigenabsorption, Einfluss des pH-Wertes, Solvatochromie; Lichtabsorption und Farbe; Charge-Transfer-Spektren

12.7.3 Gesetz der Lichtabsorption

Messgrößen (Absorption, Transmission gemäß Arzneibuch) (s.a. P/PC/AFL 5.1.5); Lambert-Beer'sches Gesetz (s.a. P/PC/AFL 5.1.5), Anwendung, Abweichungen, molarer Absorptionskoeffizient und spezifische Absorption; Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten von der Wellenlänge; Absorption von Gemischen, isosbestische Punkte

12.7.4 Messmethodik und instrumentelle Anordnung

Aufbau und Funktionsweise von Geräten zur Kolorimetrie, Photometrie und Spektralphotometrie, Spektrometer nach Arzneibuch; subtraktive und additive Farbmischung; verwendetes Licht, Lichtquellen, Monochromatoren, Küvetten, Messung der Lichtabsorption; Kalibrierung und Kontrolle nach Arzneibuch, Wellenlängenskala, Absorption, Streulicht, Auflösungsvermögen

12.7.5 Pharmazeutische Anwendungen, insbesondere nach Arzneibuch

Anwendung der in 12.7.4 genannten Methoden zu Gehaltsbestimmungen, Identitäts- und Reinheitsprüfungen von Arzneistoffen; Prüfung der Färbung von Flüssigkeiten nach Arzneibuch; Bestimmungsmethoden (Vergleichslösung; Kalibrierkurven, Aufstocken [s. 1.2.3 und 1.2.4]; Mehrkomponentenanalyse), prinzipielle Anwendung zur Strukturanalyse

12.8 Grundlagen der Fluorimetrie

12.8.1 Prinzip

Absorption von Strahlung (s. 12.7.1); Vorgänge bei Lumineszenz (Fluoreszenz, Phosphoreszenz; verzögerte Fluoreszenz); Beziehungen zwischen Struktur und Fluoreszenz, Fluorophore; Beziehungen zwischen Absorptions- und Fluoreszenzspektren; Einflüsse der Matrix, Fluoreszenzlöschung; Beziehung zwischen Intensität des Anregungslichtes, Konzentration, Quantenausbeute und Fluoreszenzintensität

12.8.2 Messmethodik und instrumentelle Anordnung

Prinzipieller Aufbau und Funktionsweise von Fluorimetern, Fluorimeter nach Arzneibuch; Anregungsquellen, Anregungs- und Emissionsmonochromator, Detektoren; Nachweis- und Bestimmungsgrenzen

12.8.3 Pharmazeutische Anwendungen, insbesondere nach Arzneibuch

Gehaltsbestimmungen, Identitäts- und Reinheitsprüfungen, Fluoreszenzmarkierung

12.9 Ramanspektroskopie

Prinzip, Anwendungsbereich