

## Übungen zur Vorlesung Struktur der Materie – Spektroskopie-Teil

### Aufgabe 6:

- Notieren Sie Fermis Goldene Regel. Welcher Term sichert die Energieerhaltung bei spektroskopischen Übergängen?
- Betrachten Sie einen reinen Rotationsübergang in einem starren Molekül. Schreiben Sie die Gesamtwellenfunktion von Anfangs- und Endzustand im Rahmen der Born-Oppenheimer Näherung.
- Notieren Sie das Dipolübergangsmoment für diesen reinen Rotationsübergang gemäß der Born-Oppenheimer-Näherung.
- Leiten Sie aus diesem Ausdruck die Auswahlregeln für den reinen Rotationsübergang ab.

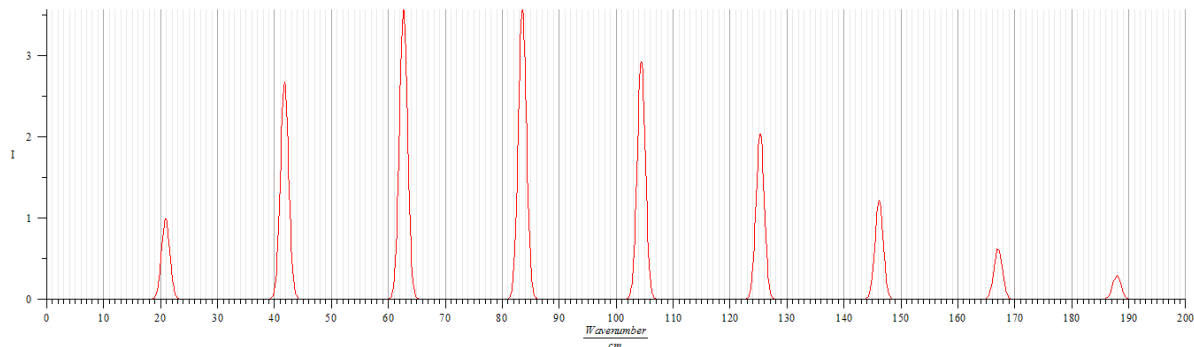
### Aufgabe 7:

Der Abstand der beiden Atome im Molekül  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  beträgt 112,8 pm.

- Bei welcher Wellenzahl erwarten Sie den Übergang  $(J = 3) \rightarrow (J = 4)$ ?
- Um wieviel  $\text{cm}^{-1}$  verschiebt sich dieser Übergang im Isotopomer  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$  unter der Annahme, dass sich der Abstand nicht ändert?
- Welches Rotationsniveau  $J$  hat die größte Besetzung bei einer Temperatur von 295 K?

### Aufgabe 8:

Betrachten Sie das Rotationsspektrum von HCl (hier eine Simulation):



- Bestimmen Sie aus dem obigen Rotationsspektrum des  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  Moleküls die Rotationskonstante  $B$  nach dem Modell des starren linearen Rotators.
- Berechnen Sie mit dem Resultat aus (a) die Bindungslänge  $R$  im  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  Molekül.
- Berechnen Sie mit  $R$  aus (b) die Rotationskonstante  $B$  für das  $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$  Molekül.
- Markieren Sie die Resonanzen des MW-Spektrums des  $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$  Moleküls in das obige Spektrum.
- Die  $D$ -Konstante des  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  Moleküls beträgt 15.836 MHz. Berechnen Sie unter Berücksichtigung der Zentrifugalaufweitung die Wellenzahl für die  $R_8$  Linie im MW-Spektrum des  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  Moleküls.
- Berechnen Sie aus  $B$  und  $D$  die Kraftkonstante der Bindung im  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  Molekül.