

Übungsblatt 7

zur Vorlesung Prinzipien der Spektroskopie

Besprechung am 20.12.2019

Aufgabe 1: Franck-Condon Prinzip

Erläutere kurz die Begriffe *Born-Oppenheimer Näherung* und *Franck-Condon Prinzip*.

Aufgabe 2: Rotations-Schwingungsspektrum von $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$

Die Anregung von Schwingungen ist häufig von simultaner Rotationsanregung begleitet.

- Der Gleichgewichtsabstand im CO-Molekül beträgt $r_e = 1.1283 \text{ \AA}$, die Kraftkonstante $k = 1901.76 \text{ N/m}$. Berechne aus diesen Daten die Vibrationskonstante ω_e und die Rotationskonstante B_e .
- Leite die Absorptionsfrequenzen zur Anregung von Vibrationen und die Absorptionsfrequenzen für die kombinierte Anregung von Vibrationen und Rotationen her. Benutze dabei das kombinierte Modell des starren Rotors und des harmonischen Oszillators. Nehme dabei an, dass die beiden Bewegungen unabhängig voneinander sind und berücksichtige die Auswahlregel $\Delta v = +1$ (Absorption). Unterscheide zwischen R-Zweig ($\Delta J = +1$) und P-Zweig ($\Delta J = -1$).
- Berechne zu einer sinnvollen Auswahl der ausgerechneten Absorptionsfrequenzen die (relativen) Intensitäten für eine Temperatur von 5000 K. Benutze für die Berechnung der relativen Besetzung der Niveaus den Ausdruck aus der Boltzmann-Statistik. Trage die Ergebnisse graphisch auf, um dein theoretisch berechnetes Absorptionsspektrum darzustellen.

Hinweis: Die Aufgabe lässt sich geschickterweise automatisiert durch ein Programm wie Excel, Origin, oder etwas selbstprogrammiertes (Python, Javascript ...) lösen. Ich freue mich über elektronisch abgegebene Aufgaben an hagen.soengen@uni-bielefeld.de.

- Die in der Realität beobachteten unterschiedlichen Abstände der Rotationsbanden lassen sich mit diesem einfachen Modell nicht beschreiben. Begründe, warum aufgrund der Schwingungsanharmonizität eine Rotations-Schwingungs-Kopplung auftritt, d.h. warum die Rotationskonstante von der Schwingungsquantenzahl v abhängt. Welchen Effekt hat eine mögliche Zentrifugaldehnung?

Aufgabe 3: Termsymbole

Bestimme alle Termsymbole des Atoms Scandium in der Grundzustandskonfiguration.