

## Übungsblatt 11

### 1) Kopplung von Rotation und Vibration

Eine gewöhnliche Methode zur Bestimmung der Rotationskonstante eines Moleküls besteht darin, Schwingungs-Rotations-Übergänge  $(v_a; J_b) \rightarrow (v_c; J_d)$  zu beobachten.

Die Auswahlregeln für solche Übergänge entsprechen denen der Schwingungsspektroskopie ( $\Delta v = \pm 1$ ) und der Rotationsspektroskopie ( $\Delta J = \pm 1$ ).

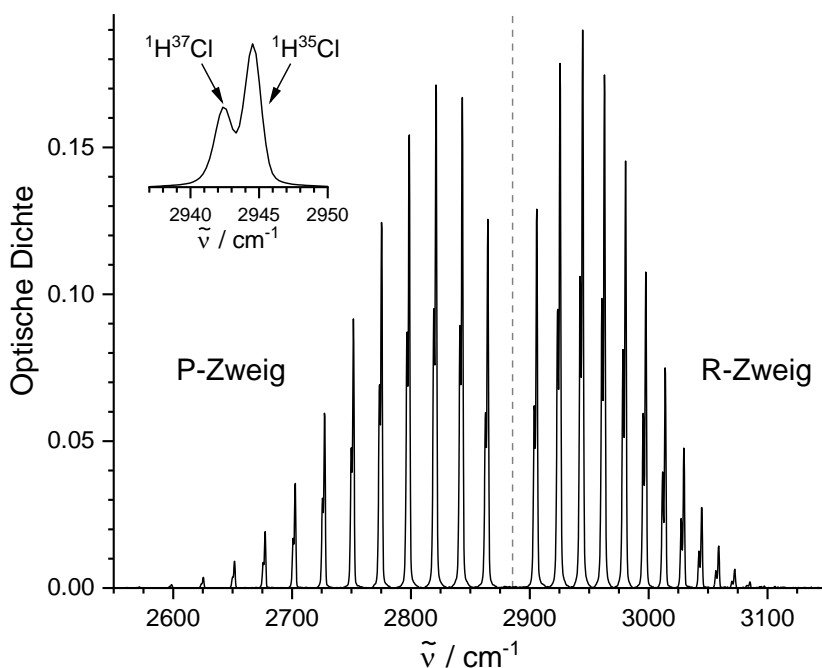
$(v = 0; J) \rightarrow (v = 1; J' = J - 1)$  Übergänge gehören zum P-Zweig ( $\Delta \tilde{\nu}_{J,J'} < \Delta \tilde{\nu}_{0,0}$ ).

$(v = 0; J) \rightarrow (v = 1; J' = J + 1)$  Übergänge gehören zum R-Zweig ( $\Delta \tilde{\nu}_{J,J'} > \Delta \tilde{\nu}_{0,0}$ ).

Ein Unterschied in Bezug auf die Mikrowellenspektroskopie im Schwingungsgrundzustand ist die Abhängigkeit der Rotationskonstante vom Schwingungszustand:  $\tilde{B} = \tilde{B}_v$ .

Unten ist das experimentelle IR-Spektrum von gasförmigem Chlorwasserstoff und die Liste der Peaks der  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ -Spezies angegeben.

Bestimmen Sie anhand dieser Daten die Rotationskonstanten  $\tilde{B}_0$ ,  $\tilde{B}_1$  und die Zentrifugaldehnungskonstante  $\tilde{D}$  (es wird hier angenommen, dass  $\tilde{D}_0 = \tilde{D}_1 = \tilde{D}$ ).



P-Zweig		R-Zweig	
$\tilde{\nu}$ cm <sup>-1</sup>	OD	$\tilde{\nu}$ cm <sup>-1</sup>	OD
2598.7	0.001	2905.9	0.127
2625.4	0.003	2925.5	0.175
2651.7	0.009	2944.6	0.186
2677.4	0.019	2962.9	0.173
2702.7	0.035	2980.6	0.144
2727.5	0.059	2997.7	0.109
2751.7	0.090	3014.0	0.075
2775.4	0.123	3029.7	0.048
2798.6	0.153	3044.7	0.028
2821.2	0.169	3058.9	0.014
2843.3	0.163	3072.5	0.006
2864.8	0.123	3085.2	0.002

