

**Übungsblatt 12** (zu bearbeiten bis 25.01.2012)**Aufgabe 1: Spektroskopische Auswahlregeln**

Wie lauten die Auswahlregeln für

- (a) Rotationsübergänge,
- (b) Vibrationsübergänge und
- (c) Ramanstreuung?

Welche der folgenden Moleküle sind rotations-, vibrations- und/oder ramanaktiv: H_2 , H_2O , H_2O_2 , CO_2 , CH_4 , CH_3CH_3 , N_2 , NH_3 , CH_3Cl ?

Aufgabe 2: Rotationsspektren

Die Rotationskonstante der Interhalogenverbindung $^{127}\text{I}^{35}\text{Cl}$ beträgt $B = 0.1142 \text{ cm}^{-1}$.

- a) Wie groß ist die Bindungslänge in $^{127}\text{I}^{35}\text{Cl}$?
- b) Welches Rotationsniveau J_{max} ist bei 298 K am stärksten besetzt? Leiten Sie zur Beantwortung der Frage zunächst eine allgemeine Gleichung für die Temperaturabhängigkeit von J_{max} her!

Aufgabe 3: Rotationsschwingungsspektroskopie

Im Rotations-Schwingungsspektrum von H^{79}Br erscheinen die ersten beiden Linien des R-Zweiges bei 2666.66 cm^{-1} und 2683.63 cm^{-1} . Berechnen Sie die Wellenzahl der Fundamentalschwingung, die Kraftkonstante und den Gleichgewichtsabstand! Vernachlässigen Sie dazu die Korrekturen für die Anharmonizität und die Zentrifugalauftreibung und nehmen Sie an, dass die Rotationskonstante unabhängig vom Schwingungszustand ist!