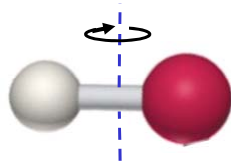


**Anregungsformen der Moleküle:**

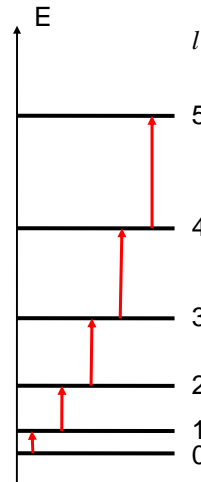
- Rotation → $E \approx \text{meV}$ (μ -Wellen)
- Schwingung → $E \approx 100 \text{ meV}$ (IR)
- elektronisch → $E \approx \text{eV}$ (UV-VIS)

7-4 / 3 Rotationsanregungen

zweiatomiges Molekül



- Trägheitsmoment $I \equiv Mr^2$
- Drehimpuls: $|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$
- Rotationsenergie: $E_{rot} = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2I}$
- Spektrallinien: $\nu = \frac{(l+1)h}{8\pi^2 \cdot I}$



7-4 / 4 Energieniveaus und Eigenfunktionen

Ergebnisse:

- Energieeigenwerte: $E_n = (n + \frac{1}{2}) \cdot \hbar\omega$; $n = 0, 1, 2, \dots$
- stationäre Wellenfunktionen:

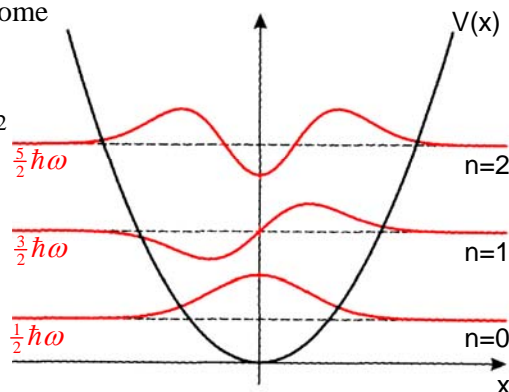
$$\Psi_n(x) = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot H_n(ax) \cdot e^{-a^2 x^2 / 2} \quad a^2 \equiv m\omega / \hbar$$

$H_n \equiv$ hermitesche Polynome

$$\Psi_2(x) = \left(\frac{a}{8\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot (4a^2 x^2 - 2) \cdot e^{-a^2 x^2 / 2}$$

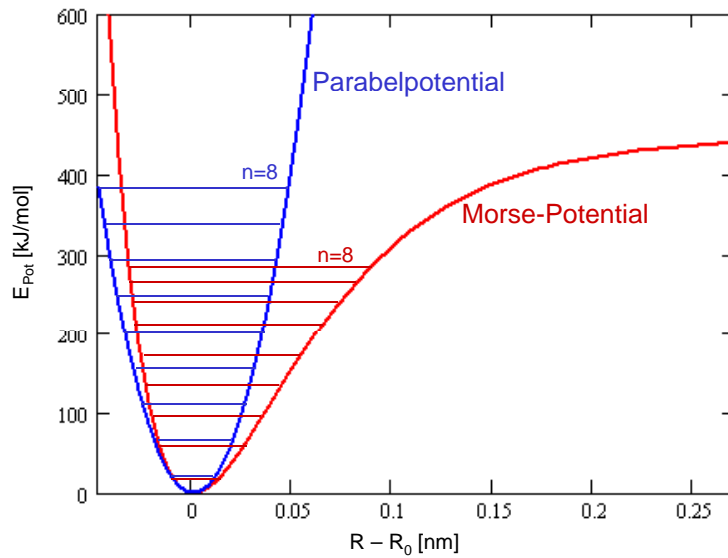
$$\Psi_1(x) = \left(\frac{a}{2\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot 2ax \cdot e^{-a^2 x^2 / 2}$$

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-a^2 x^2 / 2}$$



7-4 / 5 Schwingungsanregungen

Vergleich Morsepotential – harmonischer Oszillator für HCl:



7-4 / 6 Rotations-Schwingungsanregungen

Näherung starrer Rotator (Born-Oppenheimer Näherung):

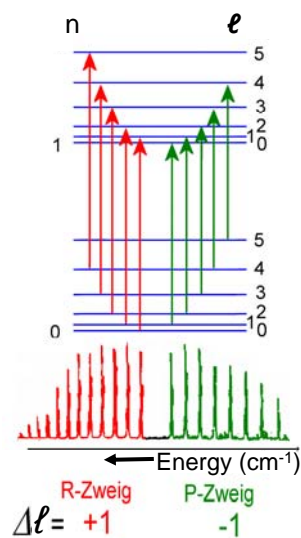
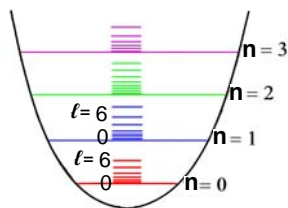
$$\rightarrow E_{\text{Schwingung}} \gg E_{\text{Rotation}}$$

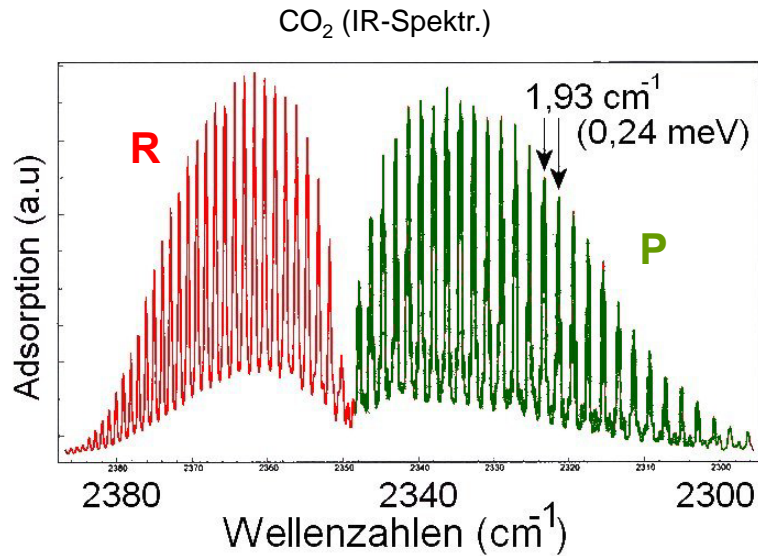
- * Schwingung $\rightarrow 10^{13}$ Hz (Moleküle schwingen)
- * Rotation $\rightarrow 10^{11}$ Hz (100 mal per Rotation)

Unabhängige Behandlung von $E_{\text{Schwingung}}$ und E_{Rotation} :

$$E = E_{\text{vibr}} + E_{\text{rot}} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I}$$

Harmonischer Oszillator





Quantenzahlen für Valenzelektronen:

Projektion L_z von Bahndrehimpuls auf Molekülachse:

$$L_z = \hbar \cdot m_l$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\lambda \equiv |m_l| = 0, 1, 2, \dots (\sigma, \pi, \delta, \dots)$$

Besetzung von Molekülorbital mit mehreren Elektronen:

Kopplung der Bahndrehimpulse zu Gesamtbahndrehimpuls

mit definierter z-Komponente:

$$\Lambda \equiv |L_z| / \hbar = 0, 1, 2, \dots (\Sigma, \Pi, \Delta, \dots)$$

Nomenklatur für Elektron in MO (AO = atomare Konfiguration) :

$$\text{Multiplizität } \Lambda_{g/u} \text{ AO } \lambda$$

