

## Übung 8

---

### 1 – Rotationspektroskopie - 3D starrer Rotator

Für Rotationsübergänge gilt die Auswahlregel  $\Delta J = \pm 1$ .

- a) Zeigen Sie, dass der energetische Abstand zwischen den Spektrallinien im Rotationspektrum eines starren Rotators konstant ist.
- b) Das Rotationspektrum von  $\text{H}^{35}\text{Cl}$  zeigt den Rotationsübergang  $\Delta J 7 \leftarrow 6$  bei einer Wellenzahl von  $145\text{ cm}^{-1}$ . Bei welcher Wellenzahl würde der entsprechende Übergang bei dem Isotopolog  $\text{D}^{35}\text{Cl}$  erscheinen?
- c) Nehmen Sie an der in Aufgabe b) betrachtete Übergang sei der Intensivste. Bestimmen Sie die ungefähre Proben temperatur von HCl.

## 2 – Rotationsniveaus

Bekanntlich wird in einer Haushaltsmikrowelle das in Lebensmitteln enthaltene Wasser mittels elektromagnetischer Strahlung (2.56 GHz) erwärmt.

Die Symmetrieachse des Wassermoleküls ist die Hauptträgheitsachse mit dem mittleren Trägheitsmoment  $I_b$ . Nehmen Sie an, Wasser sei ein prolater Kreisel. Für dessen Energieniveaus gilt die Formel:

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{I_b} J(J+1) + \left( \frac{1}{I_a} - \frac{1}{I_b} \right) K^2 \right)$$

Es stellt sich heraus, dass das  $I_a$  halb so groß ist, wie  $I_b$ .

- Skizzieren Sie die geometrischen Verhältnisse im Wassermolekül und berechnen Sie daraus  $I_b$ .
- Berechnen Sie anschließend die Energien des Übergangs  $J = 1 \leftarrow J = 0$  für ein  $\text{H}_2\text{O}$  Molekül, wobei die Rotationsachse in einem Fall senkrecht zur Symmetrieachse und im anderen parallel dazu gerichtet ist.
- In welchem Bereich des elektromagnetischen Spektrums liegen diese Übergänge?

Was bedeuten Ihre Berechnungen für den Anregungsmechanismus der Wassermoleküle in einer Mikrowelle?