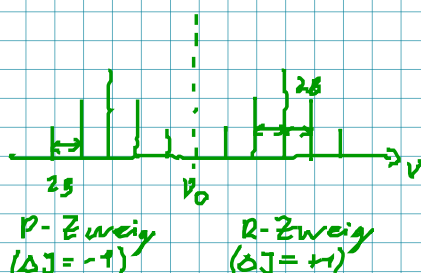


PC-VL

8.02.19

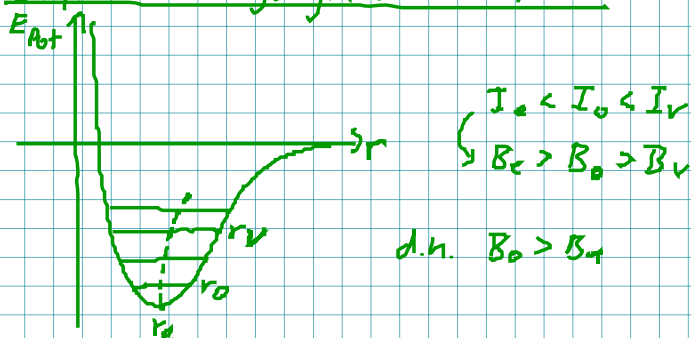
Wichtig: Schwingungsrotationspektrum
 $v=0 \rightarrow v=1$
 (Harm. Osz. + starrer Rotator)



reales Spektrum:

Linien sind nicht mehr äquidistant!

Einfluss Schwingungszustand auf B



$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_0 + B_1 J'(J'+1) - B_0 J''(J''+1)$$

P-Zweig: $\Delta J = -1 \quad J' = J'' - 1$

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_0 + J''^2 (B_1 - B_0) - J''(B_1 + B_0) \rightarrow \text{Schrift nach links}$$

R-Zweig: $\Delta J = +1 \quad J' = J'' + 1$

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_0 + 2B_1 + J''^2 (B_1 - B_0) + J''(3B_1 - B_0)$$

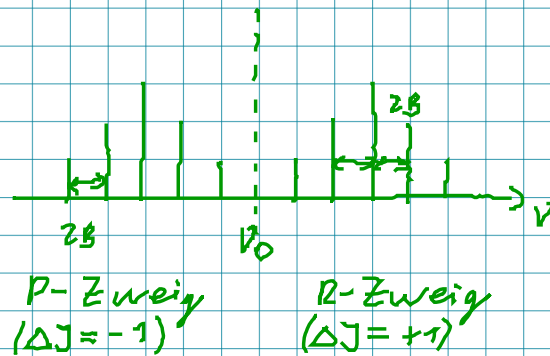
PC-VL

8.02.19

Wklg: Schwingungsrotationspektrum

$$v=0 \rightarrow v=1$$

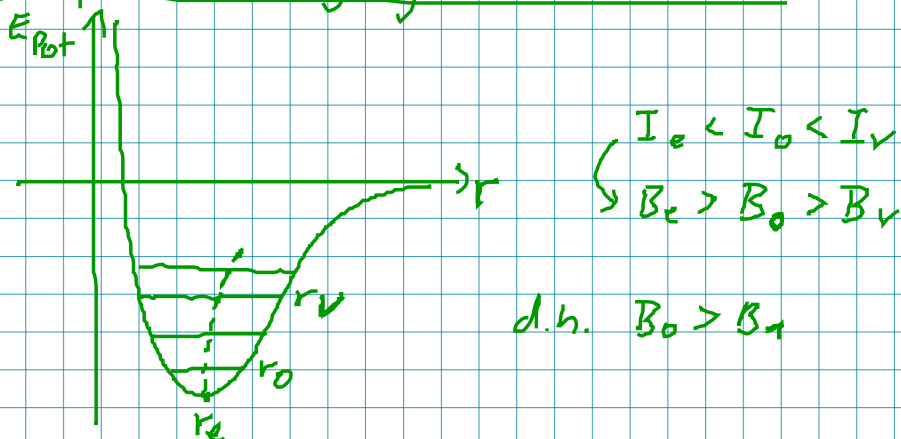
(Harm. Ose. + starrer Rotator)



reales Spektrum:

Linien sind nicht mehr äquidistant!

Einfluss Schwingungszustand auf B



$$\tilde{V} = \tilde{V}_0 + B_1 J'(J'+1) - B_0 J''(J''+1)$$

P-Zweig: $\Delta J = -1$ $J' = J'' - 1$

$$\tilde{V} = \tilde{V}_0 + \underbrace{J''^2 (B_1 - B_0)}_{-} - \underbrace{J''(B_1 + B_0)}_{+} \rightarrow \text{Schift nach links}$$

R-Zweig: $\Delta J = +1$ $J' = J'' + 1$

$$\tilde{V} = \tilde{V}_0 + \underbrace{2 B_1}_{-} + \underbrace{J''^2 (B_1 - B_0)}_{-} + \underbrace{J''(3 B_1 - B_0)}_{+}$$

11. Elektronenspekt.

11. Elektronenspekt. von Atomen

H-Atom

Übergangsdipolmoment

$$R = - \langle \Psi(n', l', m_l') | e \vec{r} | \Psi(n'', l'', m_l'') \rangle$$

$\vec{\mu} = -e \vec{r}$ momentanes Dipolmoment

Auswahlregeln:

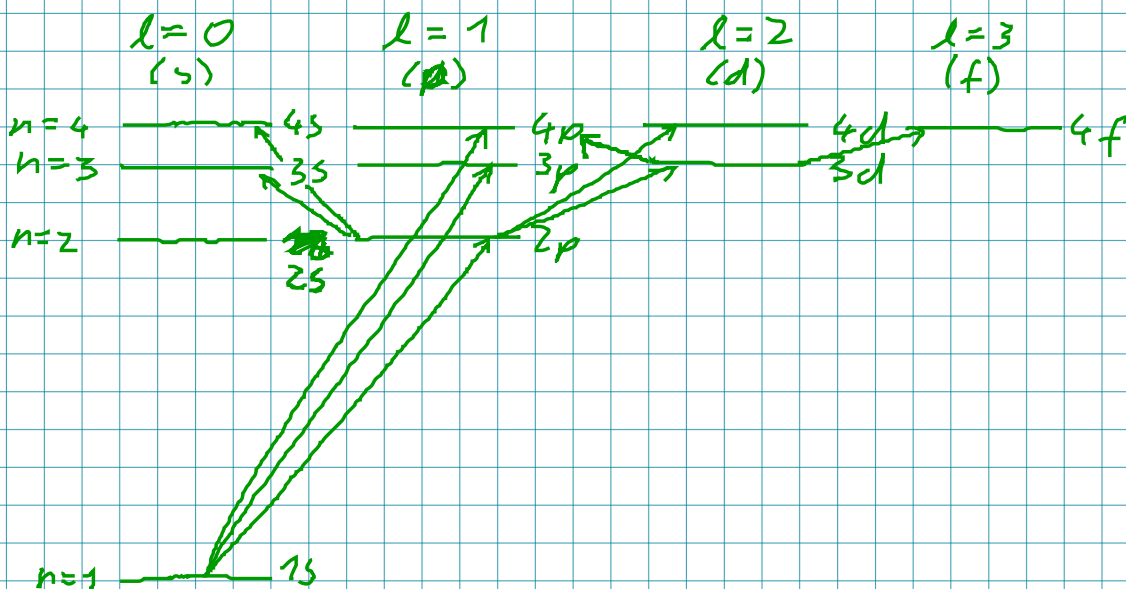
bzgl. Winkelanteil \rightarrow Starrer Rot.

$$\Delta l = \pm 1 ; \Delta m_l = 0, \pm 1$$

bzgl. Radialanteil \rightarrow keine Einschränkung

$$\Delta n = \text{keine Einschränkung}$$

z.B. $1s \rightarrow 2p$ erlaubt
 $1s \nrightarrow 2s$ verboten

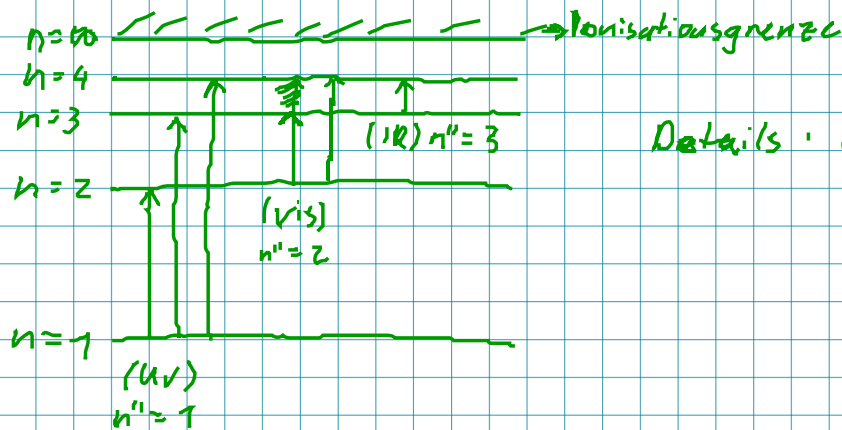


Spektrum: H-Atom

Spektrallinien: $\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n''^2} \right) \quad n' > n'' \quad (\text{in cm}^{-1})$

R = Rydbergkonst.

$= 109\,677,58 \text{ cm}^{-1}$



Details: (Hyper)-Feinstruktur

Klassifiz von $1e^-$ -Systemen

$l = 0, 1, 2, 3 \dots \quad s, p, d, f$

$s = \frac{1}{2}$

$\hookrightarrow j = l + s, l + s - 1, \dots, |l - s|$

\approx B. $l = 1; s = \frac{1}{2}; j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

Termsymbol

$z_{\text{eff}} \quad l \quad j$

$n = 2: l = 0, s = \frac{1}{2} \rightarrow j = \frac{1}{2} \rightarrow$

$l = 1, s = \frac{1}{2} \rightarrow j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \rightarrow$

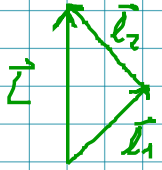
$^2S_{\frac{1}{2}}$

$^2P_{\frac{1}{2}}$

$^2P_{\frac{3}{2}}$

Mehrelektronensystem

Gesamter Bahndrehimpuls $\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$



Q.Z.: $L = \sum_i l_i$

$L = 0, 1, 2, 3, \dots$

S, P, D, F

Gesamter Spindrehimpuls: $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$



Q.Z. $S = \sum_i s_i$

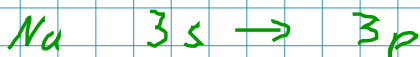
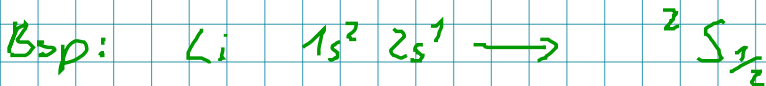
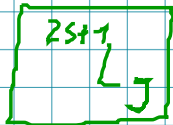
$S = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

Gesamtdrehimpuls: \vec{J}

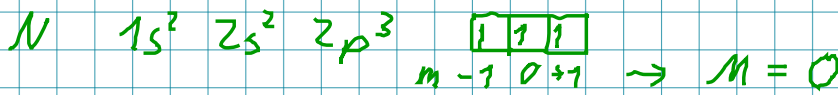
„LS-Kopplung“

$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$; $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \rightarrow \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Term symbol



$l=1, s=\frac{1}{2} \rightarrow 2P_{\frac{1}{2}}, 2P_{\frac{3}{2}}$



$\hookrightarrow L=0; s=\frac{3}{2} \rightarrow 4S_{\frac{3}{2}}$