

# VI.2.D Banden-Spektren des Moleküle

Rotations-, Schwingungs- und elektronische Anregung

$$\tilde{\nu} = T' - T'' = T_e' - T_e'' + G'(v') - G''(v'') + F'(v', J') - F''(v'', J'')$$

1-10 eV!

höchste spektrale Auflösung erforderlich!

## a) Franck-Condon-Prinzip

James Franck 1925 klassisch  
Edward U. Condon 1926 Q.M.

Kerne schwer, träge

Änderung von Lage u. Geschwindigkeit bei Schwingung  $\sim 10^{-13}$  s

elektronischer Übergang  $\sim 10^{-16}$  s

z.B.

$\leadsto$  nur "senkrechte" Übergänge in Normal-Koordinaten-Darstellung

$\leadsto$  begünstigt:  $v \neq 0$ : Umkehrpunkte  
 $v = 0$ : "Mitte"

## b) Auswahlregeln (elektrische Dipolstrahlung)

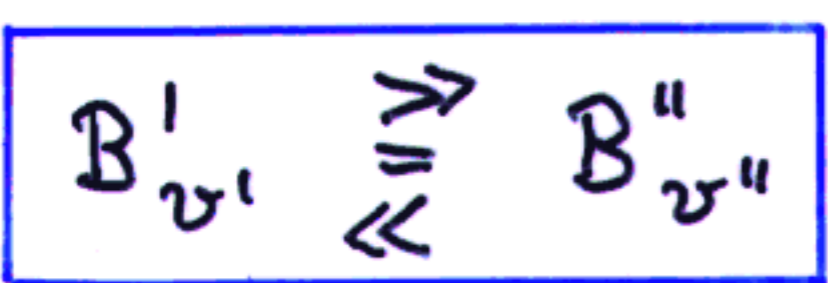
i) Paritätswechsel  $+ \leftrightarrow -$ ; ( $g \leftrightarrow u$ )

ii)  $[\Delta S = 0 \quad (\Delta \Lambda = \pm 1)]$

iii)  $\Delta v = (0, \pm 1, \pm 2, \dots)$  Franck-Condon-Prinzip!

iv)  $\Delta J = J' - J'' = -1, 0, +1$  (außer  $0 \rightarrow 0$ )

P-, Q-, R-Zweig



möglich  $\swarrow$  Kante bei  $\tilde{\nu}_0$  4 z.B.  
intensiver Banden-Kopf

"blauschattiert", "rot schattiert"  
(P-Zweig für  $B' > B''$ ), (R-Zweig für  $B' < B''$ )