

Versuch 1.2

Bandenspektrum von Jod

A. Aufgabenstellung

Im Bereich von 500 - 600 nm soll die Absorption von Joddampf photoelektrisch registriert werden. Die Bandkanten sind zu vermessen und die Konvergenzstelle des ersten Bandensystems ist im λ - $\Delta\lambda$ -Diagramm zu ermitteln. Daraus läßt sich mit der Anregungsenergie des Jodatoms ($E_A = 0,940$ eV) die Dissoziationsenergie des Grundzustands errechnen. Außerdem sollen die einzelnen Absorptionslinien den Schwingungsquantenzahlen des Anfangs- und des Endzustands zugeordnet werden. Eine zweite Absorptionsmessung wird bei höherer Temperatur aufgenommen und interpretiert.



B. Anleitung zur Theorie

Die Gesamtenergie eines zweiatomigen Moleküls setzt sich aus der kinetischen und der potentiellen Energie der Kerne und der Elektronen zusammen. Man spaltet die Summe in drei Anteile auf:

- Elektronenenergie E_{el} , bestehend aus der Energie der sich im Feld der Kerne bewegenden Elektronen und der potentiellen Energie der ruhenden Kerne
- Schwingungsenergie E_{vib}
- Rotationsenergie E_{rot} der Kerne.

a) Herleitung der Schwingungsenergie

Zunächst wird die SCHRÖDINGER-Gleichung bei Annahme eines harmonischen Oszillators gelöst. Anschließend sucht man die Eigenwerte bei Einführung von Anharmonizitäten und diskutiert das Spektrum und die Besetzung der Niveaus.

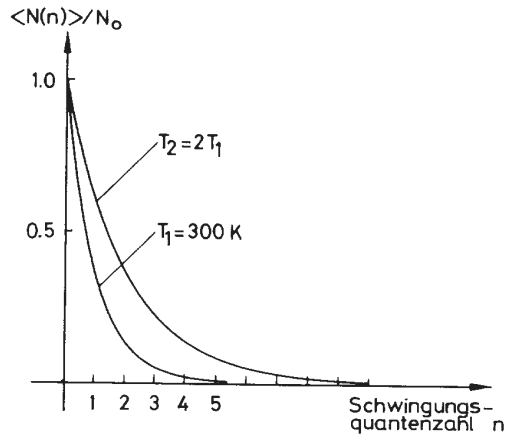


Fig.1: Relative Besetzungszahlen der Schwingungszustände am Beispiel des J_2 -Moleküls.

b) Herleitung der Rotationsenergie

Die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung mit der potentiellen Energie identisch Null liefert die gesuchten Eigenwerte. Die Änderung des Trägheitsmoments bei Variation der Quantenzahlen und mithin die Änderung der Rotationskonstanten wird in Analogie zum anharmonischen Oszillator durch zusätzliche Terme bei Eigenwerten berücksichtigt. Schließlich wird die Besetzung und das Energiespektrum diskutiert.

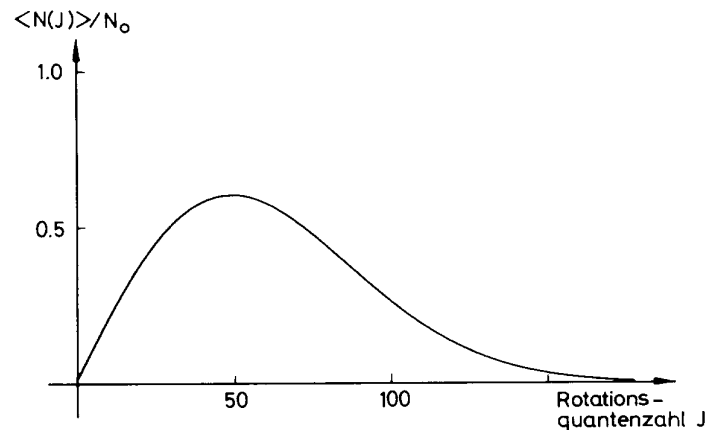


Fig. 2: Relative Besetzungszahlen der Rotationszustände am Beispiel des J_2 -Moleküls im elektronischen Grundzustand ($T = 293\text{ K}$).

c) Optische Anregung eines Moleküls

Hier werden die Wahrscheinlichkeiten einer Zustandsänderung bezüglich des Elektronen- und Schwingungszustandes angegeben. In der Diskussion werden die Eigenfunktionen der SCHRÖDINGER-Gleichung, insbesondere die der Schwingungszustände, benötigt und das FRANCK-CONDON-Prinzip erklärt.

d) Termsymbolik

Die Termsymbolik zweiatomiger Moleküle wird in Anlehnung an die der Atome aufgestellt. Dabei wird berücksichtigt, daß die Bewegung der Elektronen in dem axialsymmetrischen Feld der Kerne erfolgt.

e) Zuordnung der Schwingungsquantenzahlen

Ausgehend von der Darstellung der Schwingungsterme

$$E_{vib} = hc\omega_e \left\{ \left(v + \frac{1}{2} \right) - x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \right\}$$

erhält man für die Energiedifferenz benachbarter Schwingungszustände

$$\Delta E_{vib} = E_{vib}(v+1) - E_{vib}(v) = hc\omega_e(1 - 2x_e(v+1)),$$

also eine lineare Abnahme bei wachsender Schwingungsquantenzahl v . Bei bekannter Schwingungskonstante $\omega_e = 128,0 \text{ cm}^{-1}$ läßt sich aus einem Diagramm ΔE_{vib} über v die gesuchte Zuordnung ablesen.

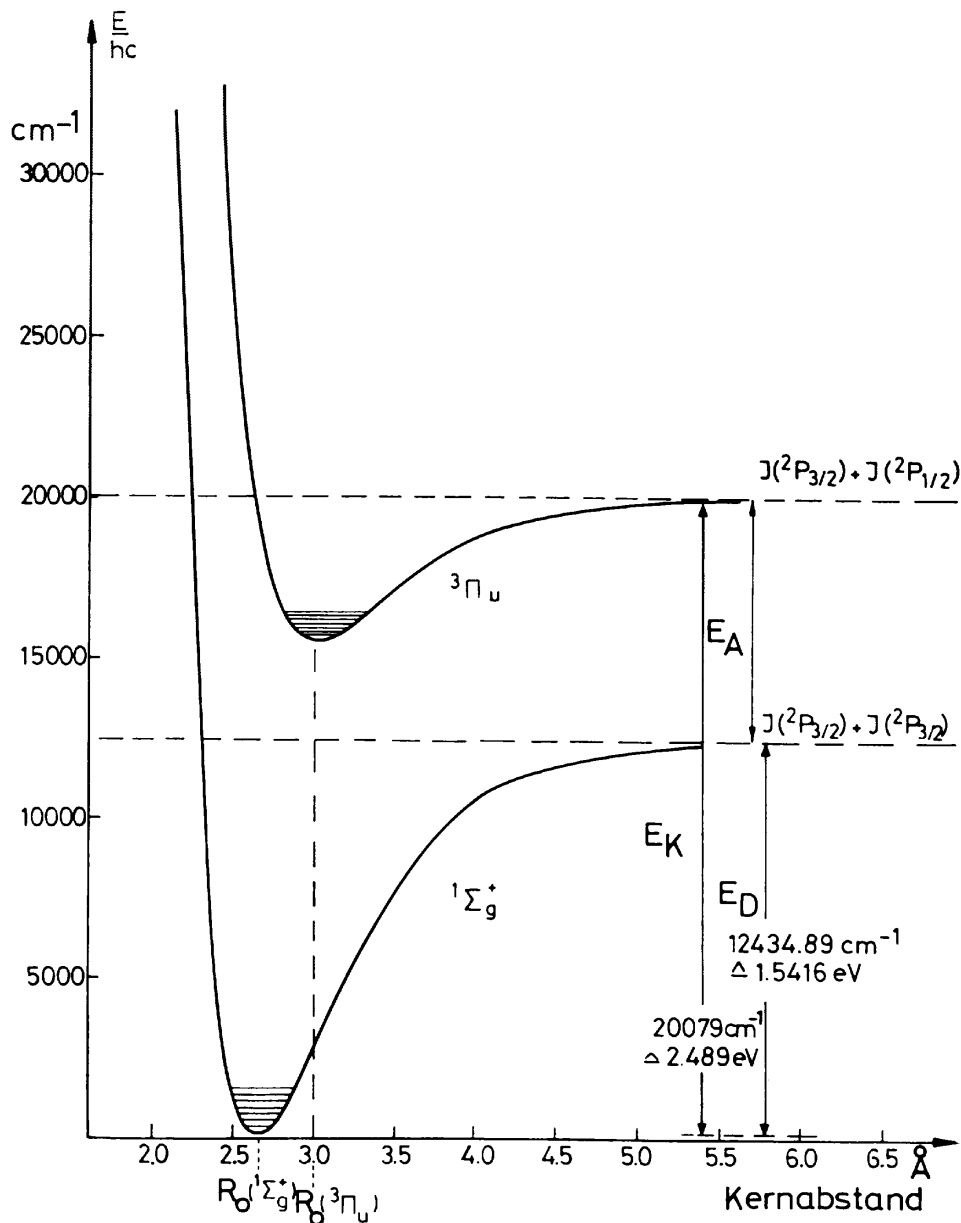
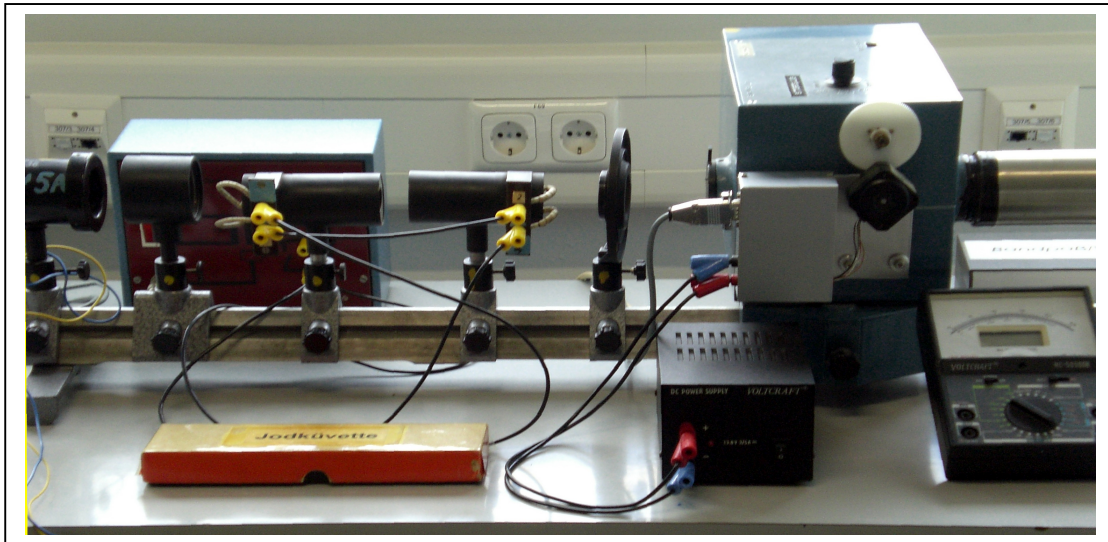


Fig. 3: Potentialkurven des Grund- und angeregten Zustandes von J_2 nach dem MORSE-Potential; E_D : Dissoziationsenergie, E_A : Anregungsenergie eines J-Atoms, E_K : Konvergenzgrenze, R_0 : Gleichgewichtsabstand.

C. Anleitung

Zum Justieren der Optik wird mit einem Multimeter das Stromsignal des SEV kontrolliert. Nachdem die Verbindungen zwischen allen benötigten Komponenten gesteckt sind, wird der Rechner eingeschaltet und von der MS-Windows-Oberfläche aus der WinLab[®]-Aufbau im Programmgruppenfenster "F-Praktikum" aufgerufen.



Bei Zimmertemperatur und bei einer höheren Temperatur wird jeweils ein Gesamtspektrum und ein Teilspektrum mit größerer Verstärkung aufgenommen. Die Spektren werden in verschiedene Dateien aufgezeichnet. Vom WinLab[®]-Linienschreiber aus kann die Lage der Absorptionslinien bestimmt werden.

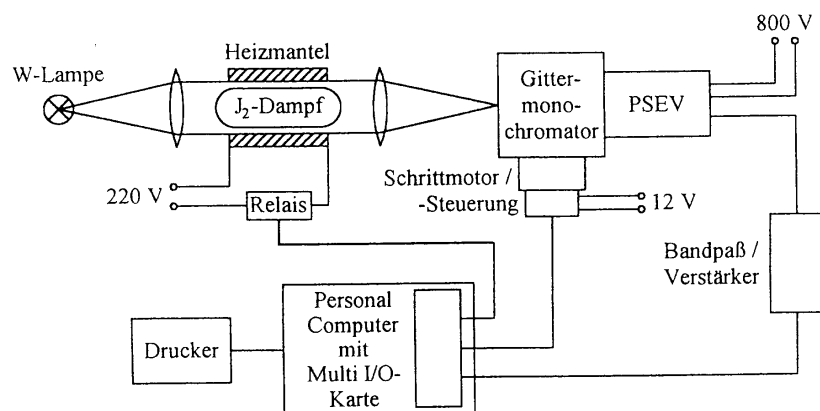


Fig. 4: Schematischer Versuchsaufbau zur spektroskopischen Untersuchung des Bandensystems am J_2 -Molekül.

D. Geräte

- 1 Glühlampe (6 V, 5 A)
- 1 Kondensorlinse
- 1 Linse ($f = 2$ cm)
- 1 Küvette mit J_2 -Dampf
- 2 Heizungsmäntel
- 1 Gittermonochromator mit Wellenlängenantrieb
- 1 Photomultiplier
- 1 Analog-Digital-Handmultimeter
- 1 Bandpaß-/Verstärkerschaltung
- 1 PC (486-DX)
- 1 Drucker (HP DeskJet 510)
- 1 Netzgerät (Gossen, 15 V)
- 1 Schiebewiderstand ($8,4 \Omega$, 8 A)
- 1 Netztrenntransformator mit Schaltrelais
- 1 Festspannungsnetzgerät (12 V)
- 1 Hochspannungsnetzgerät (Nucletron, 2500 V)

E. Literatur

- M. BÖHM, A. SCHARMANN, *Höhere Experimentalphysik*, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 1992
- W. FINKELNBURG, *Einführung in die Atomphysik*, Springer-Verlag, Berlin, Göttingen, Heidelberg, 1962
- H. HAKEN, H.C. WOLF, *Molekülphysik und Quantenchemie*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1992
- G. HERZBERG, *Spectra of Diatomic Molecules*, Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1950
- B. WEISS, *Schwingungsspektrum von J_2 -Molekülen - Ein Praktikumsexperiment*, Staatsexamensarbeit, Gießen, 1994