

Aufgabe 1

a)

Aus der Vorlesung ist bekannt, dass:

$$\Delta E_{\text{rot}} = (J+1)\hbar^2/I, \quad I = MR^2, \quad M = \frac{35.45 \cdot 1.01}{36.46} \text{ u} = 1.63069 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Aus dem Experiment erhält man $\Delta E_{\text{rot, exp}} = hc \cdot n \cdot 20 \text{ cm}^{-1}$. Wobei $n \geq 2$ dem $(J+1)$ entspricht. So erhält man den Gleichgewichtsabstand:

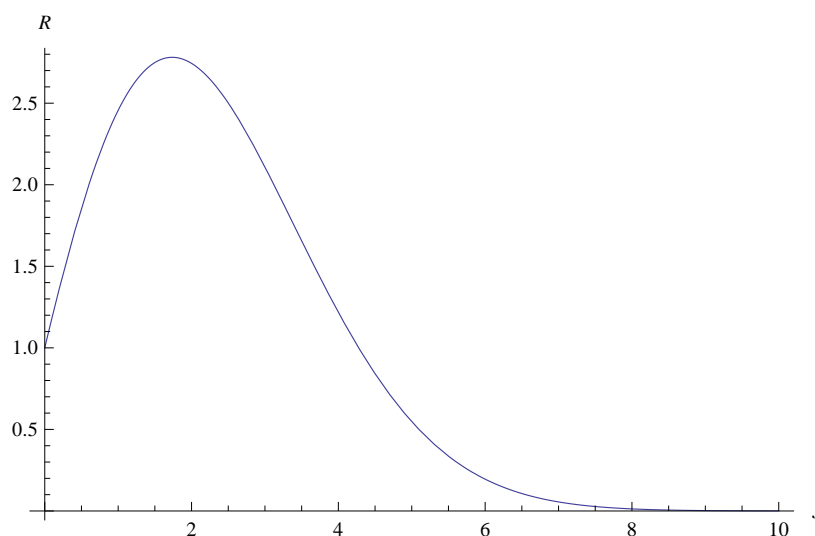
$$\frac{\hbar^2}{MR^2} = hc \cdot 20 \text{ cm}^{-1} \Rightarrow R = \sqrt{\frac{\hbar^2}{Mhc \cdot 20 \text{ cm}^{-1}}} \approx 1.3102 \text{ \AA}$$

b)

$$R = (2J+1) \cdot \exp\left[\frac{E_0 - E_j}{kT}\right], \quad E_0 = E_{j=0}, \quad E_j = J(J+1)B, \quad B = \text{const.}$$

$$R = (2J+1) \cdot \exp\left[-B \frac{J(J+1)}{kT}\right]$$

Das Maximum ergibt sich durch Ableiten und Nullsetzen:

Abbildung 1: $R = R(J)$ für $\frac{B}{kT} = \frac{1}{10}$

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dJ} \stackrel{!}{=} 0 &= \frac{1}{kT} B e^{-\frac{BJ(J+1)}{kT}} \left(\frac{2kT}{B} - (1+2J)^2 \right) \\ \Rightarrow J_1 &= -\sqrt{\frac{kT}{2B}} - \frac{1}{2} \quad J_2 = \sqrt{\frac{kT}{2B}} - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Da $J \geq 0$ gelten muss, ist nur die Lösung J_2 sinnvoll.Aus Aufgabe a) ergibt sich $B = \frac{\hbar^2}{2MR^2} = 1.23984 \text{ meV}$, es folgt:

$$J_{\text{max}} = 5.39506 \approx 5$$

Die Intensitätsverteilung der Abbildung hat ein Maximum bei $J = 3$, so erhält man die Temperatur zu:

$$T = \frac{2B}{k} (J_{\max} + 1/2)^2 = 352.5 \text{ K}$$

Die Aufspaltung in zwei Zweige erklärt sich dadurch, dass Übergänge vom Grund- ins angeregte Niveau, aber auch wieder zurück stattfinden.

Dabei stehen die R-Linien für einen $\Delta J = +1$, die P-Linien für einen $\Delta J = -1$ Übergang.

In beiden Zweigen lässt sich eine Dublettstruktur erkennen, welche durch die unterschiedliche Isotopische Zusammensetzung des Chlors (75,5% ^{35}Cl und 24,5% ^{37}Cl)¹ verursacht wird.

Aufgabe 2

Die Skizze der Potentialkurven mit Erklärung ist in Abbildung 2 zu sehen.

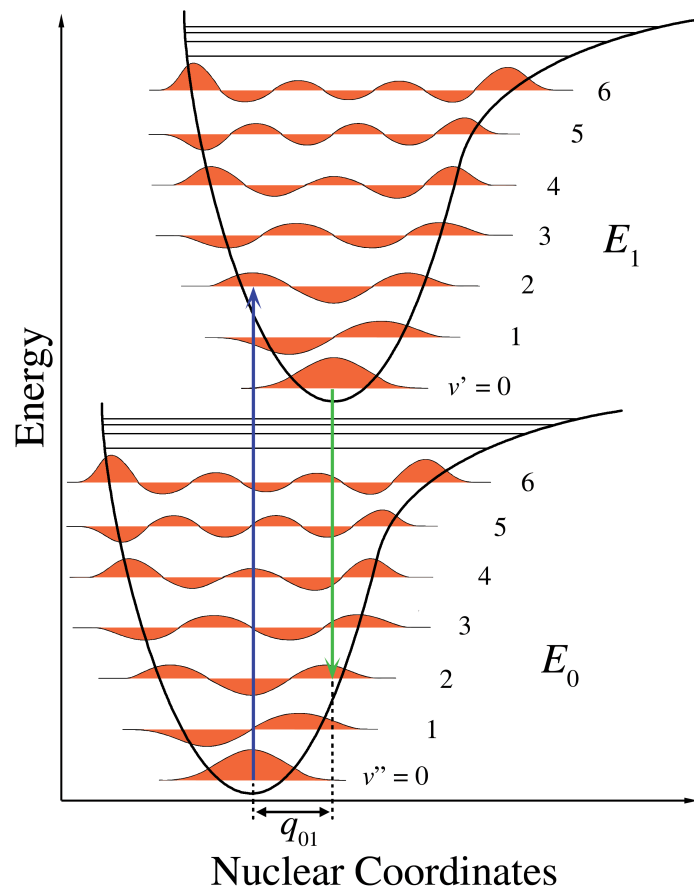


Abbildung 2: Grund- und angeregter Zustand eines zweiatomigen Moleküls mit Potential und möglichen Wellenfunktionen. Dabei bezeichnet ν'' die Vibrationszustände im Grundniveau, ν' die des angeregten Niveaus. Der blaue und grüne Pfeil markieren die wahrscheinlichen Übergänge nach dem Franck-Condon Prinzip, ausgehend bei $\nu'' = 0$ und $\nu' = 0$. Da die Elektronenübergänge verglichen mit der Kernbewegung nahezu instantan erfolgen, müssen im neuen Schwingungszustand die Positionen und Impulse mit denen des Schwingungszustands im alten Zustandes vereinbar sein. Dies erklärt die eingezeichneten Übergänge, da dort die größte Übereinstimmung vorliegt – Die Überlappung der Wellenfunktion ist am größten. Graphik nach²

¹Werte nach Demtröder, *Experimentalphysik III*, Seite 331

²<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/0/0e/Franck-Condon-diagram.png>