

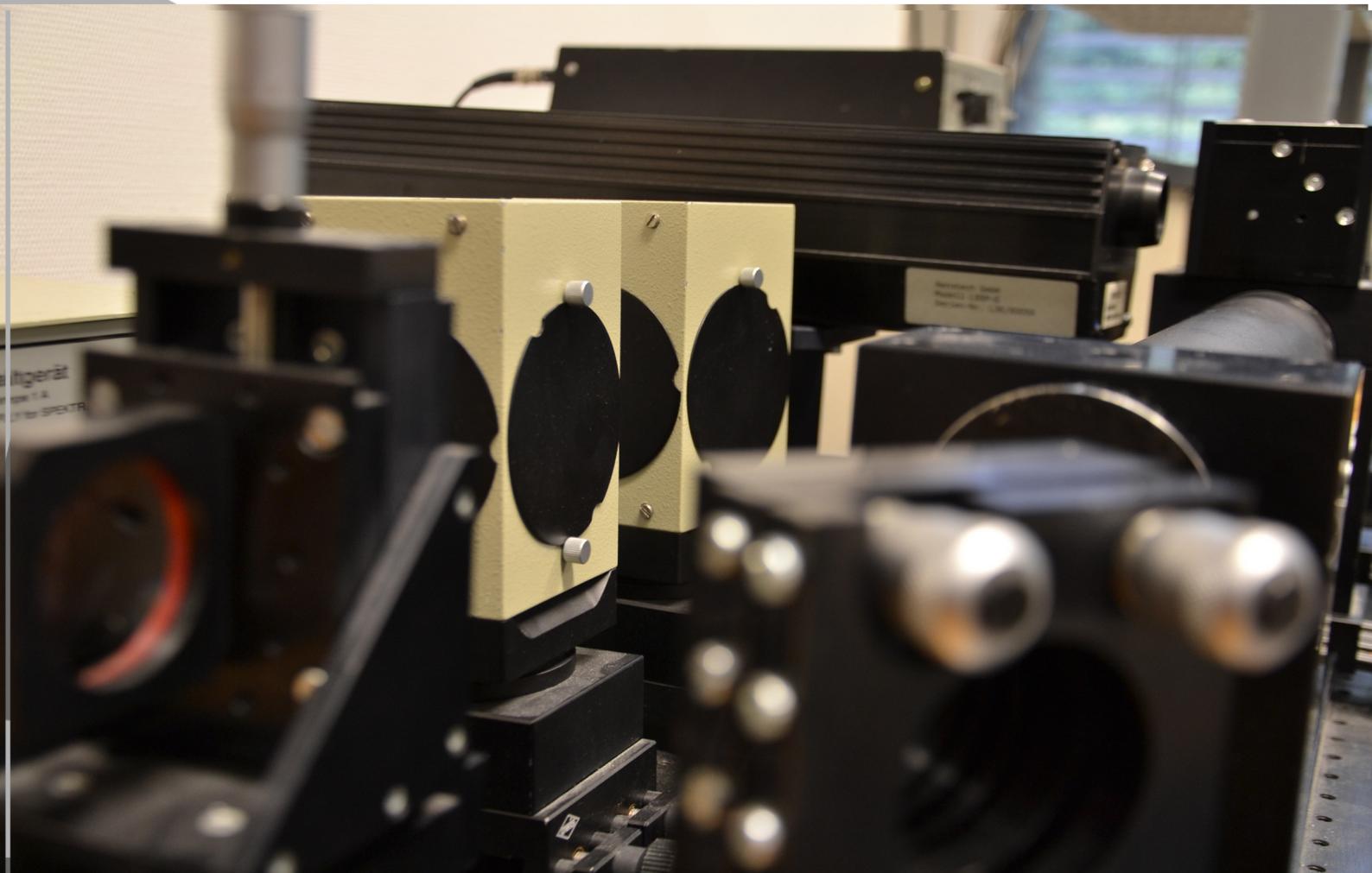


Versuchsanleitung

# Fortgeschrittenen Praktikum

## Teil I

### Spektroskopie am Jod-Molekül



FORTGESCHRITTENEN PRAKTIKUM I

---

M.MEYER (10/2014)

**Spektroskopie am Jod-Molekül**

INSTITUT FÜR MATHEMATIK UND PHYSIK  
ALBERT-LUDWIGS-UNIVERSITÄT  
FREIBURG IM BREISGAU

01. OKTOBER 2014

## Inhaltsverzeichnis

<b>1 Ziel des Versuchs</b>	<b>1</b>
<b>2 Aufgabenstellung</b>	<b>1</b>
<b>3 Theorie</b>	<b>1</b>
3.1 Born-Oppenheimer-Näherung . . . . .	1
3.2 Elektronische Übergänge . . . . .	2
3.3 Franck- Condon- Prinzip . . . . .	2
3.4 Morse- Potential . . . . .	3
<b>4 Versuchsanordnung</b>	<b>5</b>
<b>5 Gerätebeschreibung</b>	<b>5</b>
5.1 Lampen . . . . .	5
5.2 Das Jod- Rohr . . . . .	6
5.3 CCD- Spektrometer . . . . .	7
5.4 Monochromator . . . . .	7
5.5 Photomultiplier und Photometer . . . . .	8
5.6 Programme . . . . .	8
5.6.1 SpectraSuite . . . . .	8
5.6.2 JodAnalog . . . . .	9
<b>6 Versuchsdurchführung</b>	<b>10</b>
6.1 Aufnahme des Absorptionsspektrums . . . . .	10
6.2 Kalibrierung des Monochromators . . . . .	10
6.3 Aufnahme des Emissionsspektrums . . . . .	10
<b>7 Tipps zur Auswertung</b>	<b>11</b>
<b>8 Literatur</b>	<b>12</b>

## 1 Ziel des Versuchs

Dieser Versuch stellt eine Einführung in die Molekülspektroskopie dar. Am Beispiel des  $J_2$  Moleküls soll erlernt werden, wie aus den Spektren Informationen über Molekülkonstanten und damit über die innermolekularen Wechselwirkungskräfte gewonnen werden können.

## 2 Aufgabenstellung

### Absorption

1. Nehmen Sie das Absorptionsspektrum des Jod-Moleküls mit dem CCD-Spektrometer auf.
2. Identifizieren Sie die Schwingungsbanden der Progression  $v'' = 0$
3. Berechnen Sie die Schwingungskonstanten  $\omega'_e$  und  $\omega'_e x'_e$  aus dem Birge-Sponer-Plot.
4. Berechnen Sie die Dissoziationsenergie  $D_e$  auf zwei verschiedene Arten:
  - a- Über die Näherung des Morse- Potentials
  - b- Exakt, über die Termdifferenzen
5. Berechnen Sie die Anregungsenergie  $T'_e$  und die Energie, unter der das Jod-Molekül dissoziiert  $E_{diss}$
6. Zeichnen Sie das Morse-Potential für den angeregten Zustand.

### Emission

1. Nehmen Sie das Spektrum der Quecksilberdampflampe in einem Bereich von  $4000 - 6000\text{\AA}$  auf, um den Monochromator kalibrieren zu können.
2. Zeichnen Sie das Emissionsspektrum des Jod-Moleküls mit dem Monochromator in einem Bereich von  $6000 - 8000\text{\AA}$  auf.
3. Führen Sie die Kalibrierung des Monochromators durch.
4. Identifizieren Sie den vom Laser angeregten Übergang.
5. Berechnen Sie für mindestens fünf Linien die Franck- Condon-Faktoren und vergleichen die zu erwartenden relativen Intensitäten mit denen Ihrer Messung.

### 3 Theorie

#### 3.1 Born-Oppenheimer-Näherung

Diese Näherung vereinfacht die Wellenfunktion eines Moleküls, indem Kern- und Elektronenbewegung getrennt betrachtet werden. So kann die Gesamtwellenfunktion als Produkt der Einzelfunktionen geschrieben werden:

$$\Psi(r_i, R_j) = \Psi_{vib} \cdot \Psi_k^0(r_i, R_j) \quad (1)$$

Mit:

$\Psi_{vib}$ : Wellenfunktion der Kernbewegung

$\Psi_k^0(r_i, R_j)$ : elektronische Wellenfunktion

Grundlage dieser Näherung ist die Tatsache, dass die Kernbewegung aufgrund der sehr viel höheren Masse sehr viel langsamer abläuft als die der Elektronen. Die Elektronenhülle kann sich also sofort auf einen neuen Kernabstand einstellen und wird durch die Geschwindigkeit der Kernbewegung kaum beeinflusst [7].

#### 3.2 Elektronische Übergänge

Der Grundzustand des Jodmoleküls heißt  ${}^1\Sigma_{0g}^+$ .

Folgende Auswahlregeln muss man berücksichtigen, wenn man erlaubte elektrische Dipol-Übergänge identifizieren will:

- $g \leftrightarrow u, g \leftrightarrow g, u \leftrightarrow u$
- $\Delta\Omega = 0, +1, -1$
- $\Delta\Lambda = 0, +1, -1$  Kopplungsfall c
- $\Delta S = 0$  Kopplungsfall a

Wobei die letzten beiden Bedingungen nicht allgemeingültig sind, sondern jeweils nur für einen bestimmten der Hundschen Kopplungsfälle [9, S. 61ff] steht. Hierbei bezeichnet  $\Omega$  die Projektion des Gesamtdrehimpulses,  $\Lambda$  die Projektion des Bahndrehimpulses (beiden Projektionen sind jeweils auf die Molekülachse) und  $S$  den Gesamtspin der Elektronen.

Wenn man sich nun noch die Intensitäten der in Betracht kommenden Übergänge anschaut, bleibt schließlich nur noch ein Übergang übrig, der von unserem Spektrometer erfasst werden kann [1]

$$X {}^1\Sigma_{0g}^+ \leftrightarrow B {}^3\Pi_{0u}^+ \quad (2)$$

Dieser Übergang verletzt die letzte Auswahlregel, entspricht aber aufgrund der starken Spin-Bahn-Wechselwirkung auch nicht dem Kopplungsfall a), sondern c), so dass es sich trotzdem um einen erlaubten Übergang handelt. Die Struktur von Molekülübergängen sieht folgendermaßen aus:

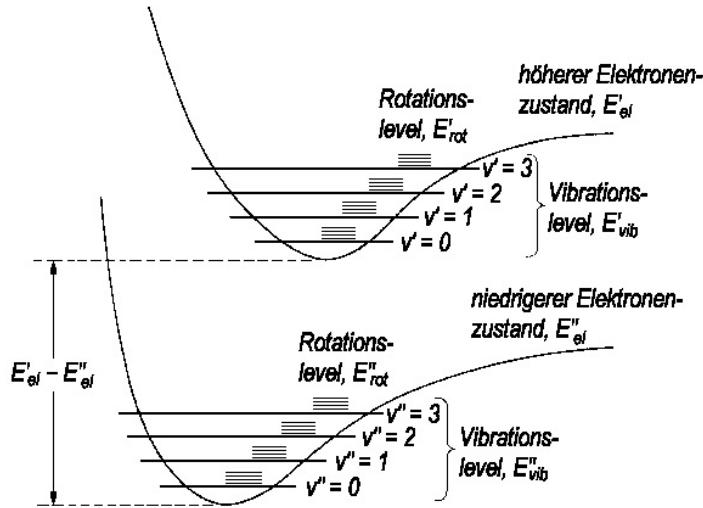
Der gesamte elektronische Übergang besteht aus einem System von Schwingungsbanden, deren relative Intensitäten durch die Franck-Condon-Faktoren (s.u.) gegeben sind.

Innerhalb dieser Schwingungsbanden gibt es weitere Linien, die von den Rotationsübergängen herrühren. Diese Rotationsübergänge sind allerdings für unseren Versuch nicht relevant, da sie nicht aufgelöst werden können.[7]

#### 3.3 Franck-Condon-Prinzip

Das Franck-Condon-Prinzip beruht darauf, dass ein elektronischer Übergang so schnell vor sich geht, dass er die langsamer ablaufende Bewegung und die kinetische Energie der Kerne nicht beeinflusst. Daher erscheint der elektronische Übergang im Potentialkurvendiagramm als senkrechte Linie (vgl. Abbildung 2).

Das Franck-Condon-Prinzip trifft eine Aussage über die Wahrscheinlichkeit eines solchen Übergangs.



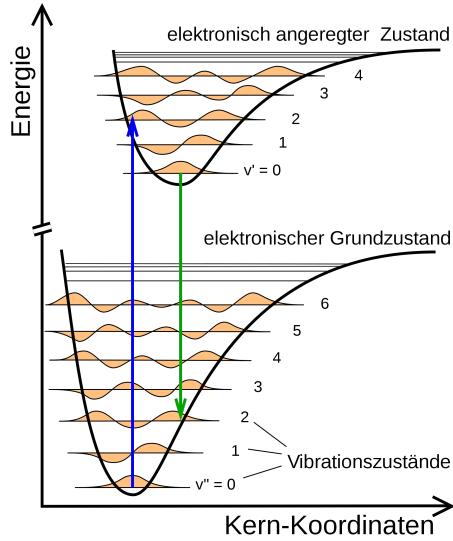
**Abbildung 1:** Veranschaulichung von elektronischen, Schwingungs- und Rotationsübergängen  
Quelle: [11]

Ein elektronischer Übergang ist umso wahrscheinlicher, je größer der Überlapp der Potentialkurven des angeregten und des Grundzustands sind.

Quantenmechanisch ist die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang durch den Franck-Condon-Faktor

$$FC(v_i, v_k) = \left| \int \psi_{vib}(v_i) \psi_{vib}(v_k) dR \right|^2 \quad (3)$$

bestimmt. Hier bezeichnet  $\psi_{vib}$  die normierten Schwingungswellenfunktionen,  $v_i$  und  $v_k$  bezeichnen die Schwingungszahlen für den Grundzustand und den angeregten Zustand [7].



**Abbildung 2:** Veranschaulichung des Franck-Condon-Prinzips  
Quelle: <http://de.wikipedia.org/wiki/Franck-Condon-Prinzip>

### 3.4 Morse- Potential

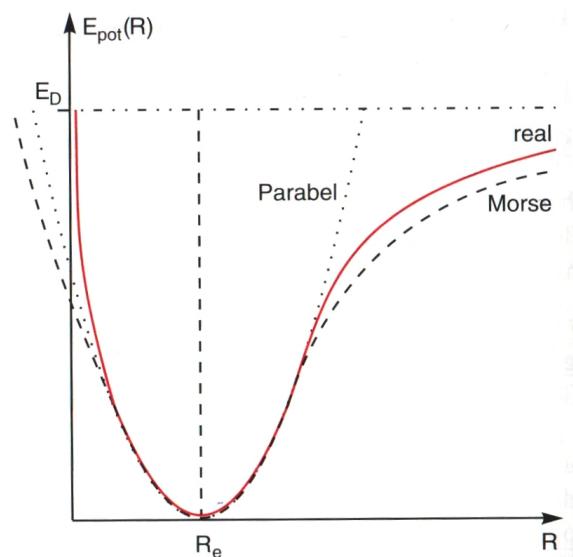
Für ein nicht rotierendes Molekül hängt die Schwingungswellenfunktion nur noch von der Form der potentiellen Energie ab. Um das reale Potential näherungsweise zu beschreiben kann man ein Parabelpotential verwenden. Dieses beschreibt den Verlauf sehr gut in der Nähe des Minimums, weicht jedoch gerade für große Kernabstände deutlich vom realen Verlauf ab.

Um das Potential - und vor allem seine Annäherung an die Dissoziationsenergie für große Kernabstände - besser beschreiben zu können, benutzt man das Morse-Potential:

$$E_{pot}(R) = E_D \times [1 - e^{-a(R-R_e)}]^2 \quad (4)$$

Diese Näherung beschreibt das reale Potential sehr gut für  $R \rightarrow \infty$  und in der Nähe des Minimums  $R = R_e$ . Für  $R \ll R_e$  ist die Näherung nicht gut.

Abbildung 3 zeigt die drei Potentiale im Vergleich [7].



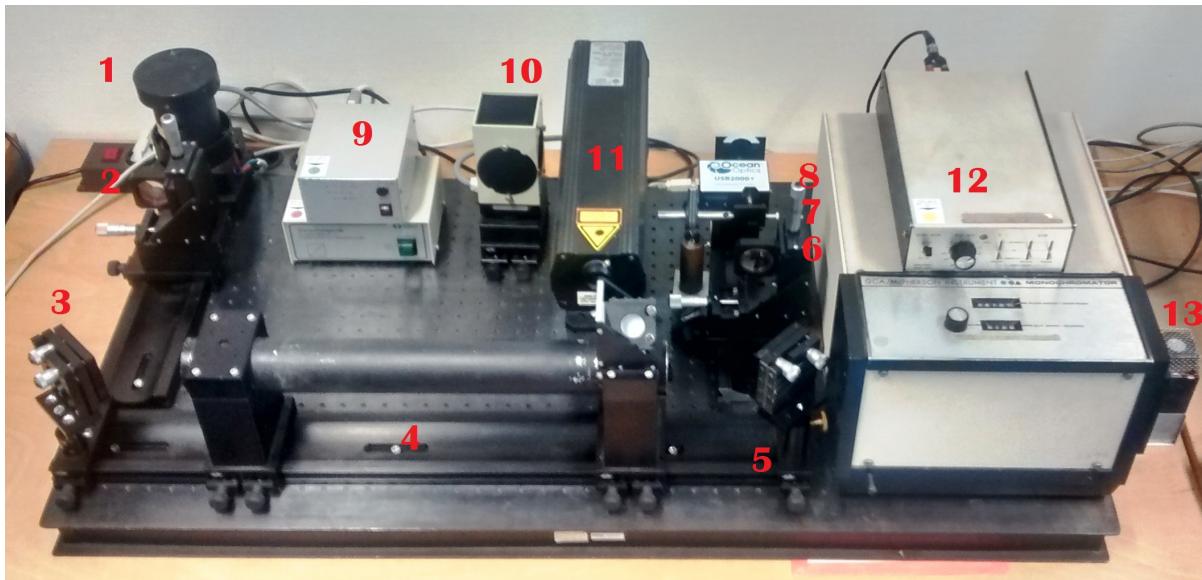
**Abbildung 3:** Vergleich von Parabelpotential, Morsepotential und realem Potential  
Quelle: [7]

Das Morse-Potential ist als Modell besonders gut geeignet, weil es exakte, analytische Lösungen der Schrödinger-Gleichung, sowohl für die Energie-Eigenzustände  $\Psi_{vib}$ , als auch für die Energie-Eigenwerte  $E_{vib}$  besitzt.

$$E_{vib}(v) = \hbar\omega_e(v + \frac{1}{2}) - \hbar\omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 \quad (5)$$

Das Morse-Potential stellt somit die einfachste Erweiterung des harmonischen Oszillators um einen Term der nächsthöheren Ordnung im Energiespektrum dar.

## 4 Versuchsanordnung



**Abbildung 4:** Versuchsaufbau, 1: Halogenlampe, 2: Linse, 3: Spiegel, 4: Jod-Rohr, 5: Spiegel, 6: Linse, 7: Filter, 8: Spektrometer, 9: Netzgeräte für die Lampen, 10: Quecksilberdampflampe, 11: Helium-Neon-Laser, 12: Monochromator, 13: Photomultiplier

Die Versuchsanordnung besteht aus einer Lampe (1), einer Linse ( $f=100\text{ mm}$ ) (2) und einem Spiegel (3), die das Licht der Lampe als paralleles Lichtbündel in das Jodrohr (4) lenken. Hinter dem Jod-Rohr steht ein Spiegel (5), der das austretenden Licht durch eine Linse ( $f=70\text{ mm}$ ) (6) auf das Spektrometer (8) fokussiert. Vor dem Spektrometer befindet sich ein Neutraldichtefilter (7), mit dem man die Intensität des Lichts abschwächen kann.

Tauscht man den Spiegel (5) mit der Linse (6), so wird das Licht der Lampe nicht mehr auf das Spektrometer (8) fokussiert, sondern auf die Eintrittsöffnung des Monochromators (12). Hinter dem Monochromator befindet sich ein Photomultiplier (13), der das vom Monochromator ausgehende Signal verstärkt. Für die Emissionsmessung wird der Helium-Neon-Laser (11) benötigt. Sein Licht kann durch einen Spiegel von oben in das Jod-Rohr gelenkt werden. Die aus dem Rohr austretende Strahlung wird mithilfe der Linse (5) auf die Eintrittsöffnung des Monochromators fokussiert.

Beide Linsen sind mithilfe von zwei Schrauben horizontal und vertikal verstellbar. Auch die Spiegel sind in zwei Ebenen verkippbar. Der Neutraldichtefilter schwächt das ankommende Licht gleichmäßig und ohne Wellenlängenabhängigkeit ab. Lampen, Jod-Rohr, Spektrometer, Monochromator und Photomultiplier sind im Kapitel *Gerätebeschreibung* detailliert beschrieben.

Neben dem optischen Aufbau befindet sich ein Regal mit drei Geräten: Dem Netzgerät für die Pelzkühlung des Photomultipliers (1), dem Netzgerät des Photomultipliers (2) und dem Diskriminator (3).

## 5 Gerätbeschreibung

### 5.1 Lampen

Die **Halogenlampe** wurde hier als Lichtquelle für die Absorptionsspektroskopie gewählt, da sie kontinuierliches Licht in ausreichender Intensität auf dem kompletten betrachteten Spektralbereich aussendet. In den Bereichen, in denen das Jod auf dem Übergang absorbiert, ist die nachgewiesene Intensität der Lampe verringert.

Zusätzlich zu dieser Lampe steht noch eine **Quecksilberdampflampe** zur Verfügung. Sie wird für die



**Abbildung 5:** Regal, 1: Netzgerät Peltierkühlung des Photomultipliers, 2: Netzgerät Photomultiplier, 3: Diskriminator

Kalibrierung des Monochromators benötigt (siehe unten). Die Quecksilberdampflampe hat ein diskretes Emissionsspektrum, das im Wellenlängenbereich von 400-600 nm folgende intensive Spektrallinien besitzt:

$\lambda$ [nm] 404,66	435,83	546,07	576,96	579,07
Bezeichnung h- Linie	g- Linie	e- Linie	orangene Doppellinie	

**Tabelle 1:** Sichtbare intensive Spektrallinien der Hg- Lampe

Quelle: NIST atomic spectra database

**Achtung!** Die Lampen sollten nur sehr vorsichtig bewegt werden, wenn sie heiß sind, da sie leicht kaputt gehen können.

## 5.2 Das Jod- Rohr

Das Jod-Rohr besteht aus einem Glasrohr mit 50 cm Länge und 4 cm Durchmesser, in dem sich einige Jodkörnchen befinden. Um dieses Rohr herum befindet sich ein Metallzylinder, der Streulicht abschirmt soll. Am hinteren Ende des Zylinders befindet sich eine Lochblende, mit der die aus dem Rohr austretende Intensität reguliert werden kann. Auf dem Jod-Rohr befindet sich ein Spiegel, mit dem das von der Seite her eingestrahlte Licht des Helium-Neon-Lasers in das Rohr reflektiert werden kann. Dieser Spiegel ist in zwei Richtungen verkippbar, so dass das Licht des Lasers möglichst gerade durch das Rohr hindurch gelenkt werden kann.

Jod steht im Periodensystem der Elemente an 53. Stelle, hat eine relative Atommasse von 126,9u und eine Dichte von 4,93 g/cm<sup>-3</sup>. Die Siedetemperatur von Jod liegt bei 184,4 °C.

Für diesen Versuch wurde das Jodmolekül ausgesucht, da es im sichtbaren Spektralbereich ausgedehnte Absorptionsbandensysteme besitzt. Anders als bei Brom und Chlor, auf die diese Eigenschaft ebenfalls zutrifft, hat Jod den zusätzlichen Vorteil, dass es in der Natur nur ein einziges stabiles Isotop gibt. Wenn mehrere Isotope eines Moleküls vorliegen, vermischen sich die Bandenstrukturen und sind nicht mehr so gut zu erkennen.

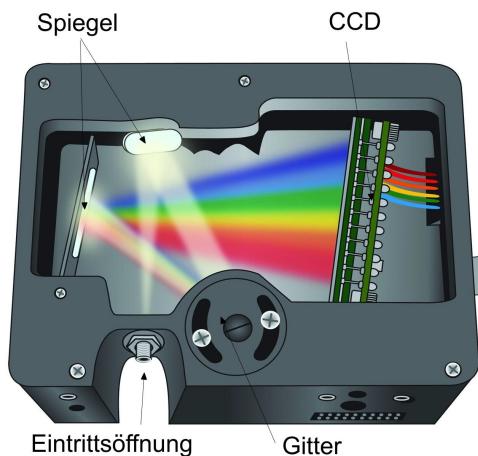
Trotz der hohen Siedetemperatur liegen auch bei Raumtemperatur schon genug der Jod- Moleküle in

der Gasphase vor, so dass man gute Absorptions- und Fluoreszenzsignale bekommt.

### 5.3 CCD- Spektrometer

Als *Charge Coupled Device* (CCD) bezeichnet man ein lichtempfindliches, elektronisches Bauteil, das auf dem inneren Photoeffekt beruht. Es besteht aus dotierten Halbleitern. Ein einfallendes Photon erzeugt ein Elektronen- Loch- Paar. Das Elektron kann aufgrund der angelegten Spannung jedoch nicht abfließen, sondern wird im Potentialtopf gespeichert. Die gespeicherte Menge an Elektronen ist direkt proportional zur Photonenmenge. Durch Öffnen des Potentialtopfes kann die gespeicherte Menge Elektronen ausgelesen werden.

Eingesetzt werden diese Bauteile zum Beispiel in Digitalkameras, Scannern und Spektrometern. Das hier eingesetzte USB2000+ ist ein CCD-Gitterspektrometer. Durch den Eintrittsspalt gelangt das Licht ins Innere des Spektrometers, wo es über einen Spiegel auf ein Gitter gelenkt wird. Durch das Gitter wird das Licht spektral aufgespalten und über einen weiteren Spiegel auf das CCD reflektiert, so dass das Spektrum ausgelesen werden kann. Das Spektrometer wird über ein USB- Kabel mit dem Computer verbunden und das Spektrum kann mit der Software *SpectraSuite* weiterverarbeitet werden. Unser Spektrometer verfügt über einen  $5 \mu\text{m}$  Eintrittsspalt, hat einen Wellenlängenbereich von 400-719 nm und eine spektrale Auflösung von 0,4 nm.



**Abbildung 6:** Innerer Aufbau des USB2000+ Spektrometers  
Quelle: OceanOptics Germany GmbH

### 5.4 Monochromator

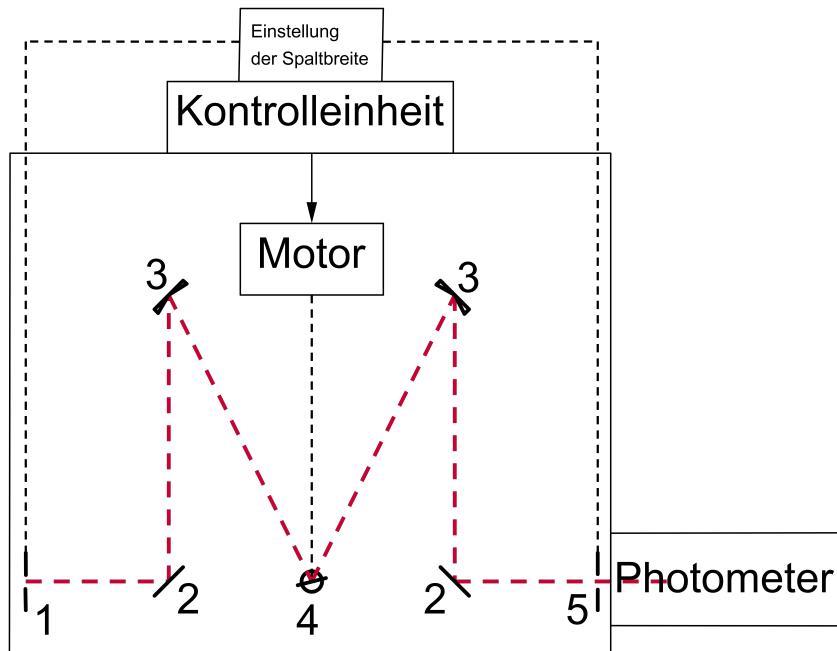
Der für unseren Versuch eingesetzte Gitter-Monochromator besteht aus einer großen Monochromator- und einer kleinere Kontrolleinheit.

Innerhalb der Monochromatoreinheit ist der optische Aufbau des Monochromators untergebracht (vgl. Abb. 7).

Durch den verstellbaren Eintrittsspalt gelangt, das Licht in den Monochromator, wo es über einen Planspiegel (2) und einen Hohlspiegel (3) auf ein Gitter (4) reflektiert wird. Am Gitter wird das Licht aufgrund der wellenlängenabhängigen Beugung spektral aufgefächert. Durch einen Motor kann das Gitter gedreht werden, so dass das aufgefächerte Spektrum (wiederum über zwei Spiegel) am Austrittsspalt vorbeiläuft und mithilfe des Photometers weiterverarbeitet werden kann. Eintritts- und Austrittsöffnung sind gekoppelt zwischen  $5 - 2000 \mu\text{m}$  verstellbar.

**Achtung!** Der Spalt darf niemals unter  $5 \mu\text{m}$  eingestellt werden!

Mithilfe der Kontrolleinheit kann das Gitter auf verschiedenen Wellenlängen eingestellt werden. Es gibt



**Abbildung 7:** Schematischer Aufbau des Monochromators, 1: Eintrittsspalt, 2: Planspiegel, 3: Hohlspiegel, 4: Gitter, 5: Austrittsspalt

einen Schnelllaufmotor, für das genaue Ansteuern einer Wellenlänge und einen Schrittmotor, der das Spektrum langsam durchfährt. Auch die Geschwindigkeit des Schrittmotors kann an einem Drehknopf an der Kontrolleinheit eingestellt werden. Der Knopf zum An- und Ausschalten der Kontrolleinheit befindet sich auf der Rückseite rechts.

## 5.5 Photomultiplier und Photometer

Hinter dem Monochromator folgen noch weitere elektronische Bauteile, mit denen das Signal verstärkt und verbessert werden kann. Der Photomultiplier verstärkt das vom Monochromator ausgehende Signal und leitet es weiter an die Photon Counting Unit, die das Signal umwandelt, so dass es vom Computer ausgelesen werden kann. Innerhalb der Photon Counting Unit befindet sich auch der Diskriminator, mit dem man Zählraten pro Sekunde, Fehler der Zählrate und eine Zeitkonstante festlegen kann. Mit diesen Einstellungen kann die Empfindlichkeit und Genauigkeit des ankommenden Signals geregelt werden. Photon Counting Unit und Diskriminator werden zusammengefasst als Photometer bezeichnet. Der Photomultiplier hat eine Betriebsspannung von 1000 V. Die genaue Funktionsweise dieser Geräte entnehmen Sie bitte der Staatsexamensarbeit [1], Kap. 6.3.6-6.3.8, oder der Gerätebeschreibung im Ordner beim Versuch.

## 5.6 Programme

### 5.6.1 SpectraSuite

Die vom CCD-Spektrometer aufgenommenen Signale können mit der Software *SpectraSuite* am Computer ausgelesen werden. Das Icon zum Öffnen des Programms befindet sich auf dem Desktop.

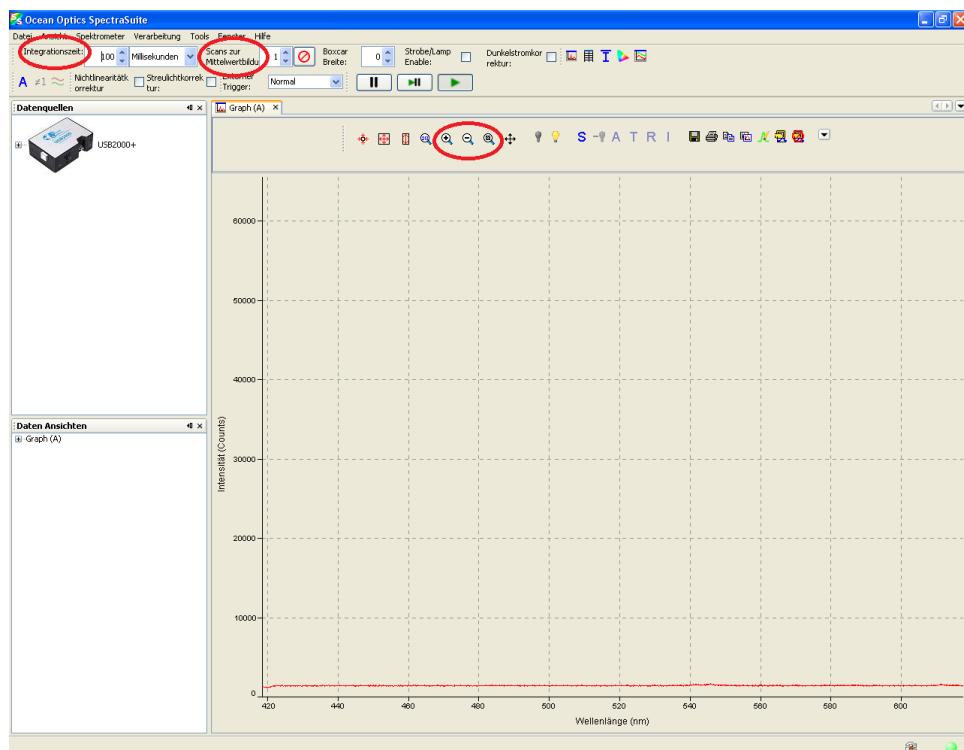
**Wichtig!** Achten Sie darauf, dass das Spektrometer an den Computer angeschlossen ist, bevor Sie das Programm starten. Schließen Sie das Spektrometer erst im Nachhinein an, erkennt das Programm das Gerät nicht mehr als Datenquelle.

Ist das Spektrometer mit dem Computer verbunden, so erscheint es in der linken Spalte des Programmfensters. Man kann nun auf dem Bildschirm direkt das übermittelte Spektrum sehen.

Um das Spektrum weiter zu verbessern, kann man in der oberen Leiste einige Einstellungen vornehmen:  
**Integrationszeit:** Durch Einstellen der Integrationszeit legt man fest, über welche Zeitspanne die auf dem CCD ankommenden Photonen gezählt werden. Man kann hiermit also die Intensität des Spektrums verändern, um Peaks mit geringer Intensität sichtbar zu machen, oder ein übersteuertes Signal herunter zu regeln.

**Scans zur Mittelwertbildung:** Mit dieser Einstellung wird festgelegt, wie viele Spektren vermessen werden sollen, um aus deren Mittelwert das angezeigte Spektrum zu ermitteln. Diese Funktion kann helfen eine glattere Kurve zu bekommen.

In der Symbolleiste direkt über dem Spektrum kann man mithilfe der Lupen in das Spektrum hinein und hinaus zoomen, oder einen interessanten Bereich zum Vergrößern auswählen (Lupe mit Kästchen).



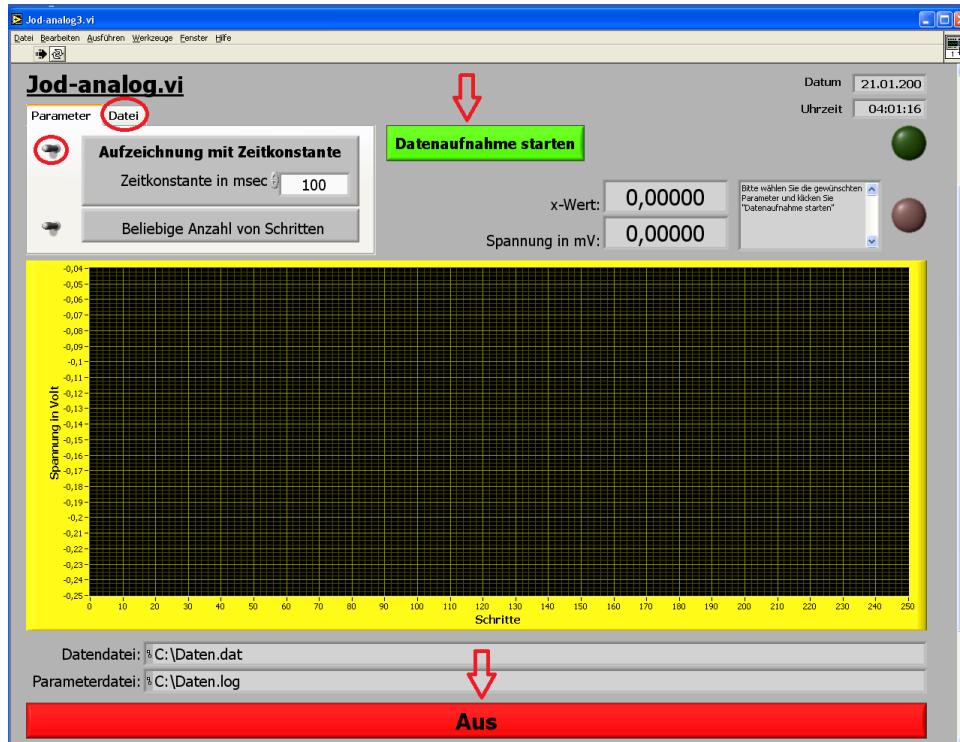
**Abbildung 8:** Screenshot des Startbildschirms des Programms SpectraSuite, die im Text beschriebenen Einstellungen sind rot markiert

### 5.6.2 JodAnalog

Für die Auswertung des Emissionsspektrums benötigt man das Programm *JodAnalog*.

Bevor man eine Messung starten kann, müssen zuerst einige Einstellungen am Computerprogramm vorgenommen werden. Als Erstes sollte man in der Registerkarte *Parameter* den Hebel nach rechts stellen. Die x- Achse zeigt dann keine zeitabhängige Skala mehr, sondern eine wellenlängenabhängige. Die Startwellenlänge des Monochromators kann auf der Registerkarte eingegeben werden. Auf der Registerkarte *Datei* muss ein Speicherort für die Messdaten festgelegt werden. Sind diese beiden Einstellungen vorgenommen worden, kann man eine *Datenaufnahme starten*. Nach Drücken dieses Knopfes befindet sich das Programm im Standby- Modus. Stellt man nun das schrittweise Durchfahren des Monochromators ein, läuft das Programm automatisch mit. Beim Anhalten des Monochromators, stoppt auch die Messung am Computer.

**Wichtig:** Nach Beendigung der Messung muss im Programm der Knopf *Aus* gedrückt werden, da die Daten sonst nicht abgespeichert werden.



**Abbildung 9:** Screenshot des Startbildschirms des Computerprogramms JodAnalog, die im Text beschriebenen Funktionen sind rot markiert

## 6 Versuchsdurchführung

### 6.1 Aufnahme des Absorptionsspektrums

Mithilfe beider Linsen und Spiegel wird das Licht der Halogenlampe zunächst auf ein Blatt Papier (aufgestellt an der Stelle, an der später das Spektrometer stehen soll) fokussiert, so dass die Glühwendel der Lampe scharf zu sehen ist. Nun kann das Blatt durch das Spektrometer ersetzt werden.  
**Achtung!** Der Spalt, auf den beim Spektrometer fokussiert werden muss, befindet sich nicht an der Eintrittsöffnung, sondern einige mm weiter innen!

### 6.2 Kalibrierung des Monochromators

Für die Kalibrierung des Monochromators wird die Halogenlampe durch die Quecksilberdampflampe und der Spiegel (5) durch die Linse (6) ersetzt. Die Peltierkühlung und das Netzgerät des Photomultipliers werden angeschaltet. Die Betriebsspannung des Photomultipliers liegt bei 1000 V und ist voreingestellt. Auch die Kontrolleinheit und der Diskriminator müssen angeschaltet werden.

Nun wird das Licht der Quecksilberdampflampe auf den Eintrittsspalt des Monochromators fokussiert und das Spektrum in einem Bereich von 4000-6000 Å aufgezeichnet. Bei der Wahl der weiteren Einstellungen an Monochromator und Diskriminator kann etwas ausprobiert werden, wichtig ist nur, dass die intensiven Linien des Spektrums nicht übersteuern.

### 6.3 Aufnahme des Emissionsspektrums

**Wichtig!** Notieren Sie sich bei allen Messungen mit dem Monochromator Anfangs- und Endwellenlänge, wie sie am Monochromator angezeigt werden.

Für diese Messung wird der Laser angeschaltet und der Raum abgedunkelt. Mithilfe des Spiegels auf dem Jod-Rohr und der Linse wird das aus dem Rohr tretende Licht auf die Öffnung des Monochromators fokussiert. Der Monochromator wird auf die Resonanzfrequenz  $f = 6330\text{Å}$  des Lasers mit einer Spaltöff-

nung von  $370\mu m$  eingestellt. Der Spiegel und die Linse werden nun so verstellt, dass der Diskriminator maximale Intensität anzeigt. Dann wird am Monochromator eine Wellenlänge von ca.  $6495 - 6510\text{\AA}$  eingestellt. Hier hat das Emissionsspektrum sein Maximum. Nun wird erneut justiert, bis der Monochromator auch hier maximale Intensität anzeigt.

**Achtung:** Da das Fluoreszenzspektrum eine sehr viel geringere Intensität besitzt müssen die Einstellungen am Diskriminator stark angepasst werden.

Dann wird das Spektrum in zwei Teilen vermessen:

Die erste Messung geht von  $6320 - 6350\text{\AA}$  mit einer Schrittgeschwindigkeit des Monochromators von  $2\frac{\text{\AA}}{\text{s}}$  einem Eintrittsspalt von  $50 \mu m$ . Diese Messung zeichnet den Resonanzlaser-Peak auf.

Die zweite Messung geht von  $6400 - 8000\text{\AA}$  mit einer Schrittgeschwindigkeit von  $1\frac{\text{\AA}}{\text{s}}$  und einem Eintrittsspalt von  $370 \mu m$ . Diese Messung zeichnet das Fluoreszenzspektrum auf.

## 7 Tipps zur Auswertung

- Zur Identifizierung der Banden ist das Spektrum in einem Spektralbereich von 495-600 nm wichtig. Als Hilfe soll verwendet werden, dass die Absorptionsbande bei einer Wellenlänge von  $\lambda = 545,8\text{nm}$  vom Übergang  $v'' = 0 \rightarrow v' = 25$  herröhrt. Von dieser Bande ausgehend kann man die andern Banden nach oben und unten gemäß dem Franck-Condon-Prinzip durchnummerieren
- Bevor Sie die mit dem Monochromator aufgenommen Spektren auswerten können, müssen Sie eine Anpassung der x-Achsenkalierung vornehmen. Verwenden Sie dazu Ihre Notizen von Anfangs- und Endwellenlänge des Monochromators oder den Zusammenhang in der Staatsexamensarbeit [1].
- Um die Schwingungsübergänge im Emissionsspektrum identifizieren zu können, legen Sie eine Tabelle mit theoretisch berechneten Wellenzahlen für möglichst viele Schwingungszahlen  $v'$  und  $v''$  an und vergleichen diese mit denen aus Ihrem Spektrum.

## 8 Literatur

### Wissenschaftliche Arbeiten

1. MEYER, MARTINE: *Verbesserung des Versuchs Spektroskopie am J<sub>2</sub>- Molekül des Fortgeschrittenen Praktikums*, Staatsexamensarbeit, Freiburg, 2014
2. RANK, D.; RAO, B.: *Molecular Constants of the Ground State of J<sub>2</sub>*, Journal of Molecular Spectroscopy 13 (1964) p. 34-42
3. STEINFELD, J. ET AL: *Spectroscopic Constants and Vibrational Assignment for the B 3Π<sub>ou</sub><sup>+</sup> State of Jodine*, Journal of Chemical Physics 42 (1965) p. 25-33
4. ZARE, R.: *Calculations of Intensity Distribution in the Vibrational Structure of electric Transitions*, Journal of Chemical Physics 40 (1964) p. 1934- 1944
5. <http://www pci.tu-bs.de/aggericke/PC4/>, Vorlesungsskript Kapitel III

### Weiterführende Literatur

#### Zur Theorie des Jod-Moleküls:

6. HELLWEGE, K.H.: *Einführung in die Physik der Moleküle*, Kap. A, B, C, D, E.12, F.14 bis F.17, Springer Verlag, 1974 (komprimierte Darstellung)
7. DEMTRÖDER: *Experimentalphysik 3 - Atome, Moleküle und Festkörper*, Kapitel 9, 10
8. KING, G.W.: *Spectroscopy and Molecular Structure*, Kap. 4.1., 4.2., 4.3.; 5.1. bis 5.12; 6.1, 6.10 bis 6.17, Holt, Rinehardt and Winston, New York, 1964
9. HERTEL, SCHULZ: *Atome, Moleküle und optische Physik 2*, vor allem Kap. 11; 15, Springer Verlag, Berlin, 2010
10. HERZBERG, G.: *Spectra of Diatomic Molecules*, Kap. (II); III 1.(a), (b); 2.(a) bis (e); IV 1.; 2. bis Seite 157; 3. bis Seite 172; 4.(a) bis Seite 202; (gute, aber ausführliche und zeitraubende Darstellung)
11. <http://www pci.tu-bs.de/aggericke/PC4>, Kapitel III und IV