

**Übungsblatt 1****Aufgabe 1: Lebensdauer- und Dopplerverbreiterung**

Die Anzahl  $z$  der Zusammenstöße pro Zeiteinheit, die ein Teilchen in einem Gas beim Druck  $p$  erfährt, beträgt

$$z = 4\sigma \left( \frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \cdot \frac{p}{kT}$$

wobei  $\sigma$  der Stoßquerschnitt ist.

a) Finden Sie einen Ausdruck für die stoßbegrenzte Lebensdauer unter der Annahme, dass jeder Zusammenstoß effektiv ist, d.h., zur Abregung eines bestimmtem angeregten Zustands führt.

b) Berechnen Sie die Halbwertsbreite (FWHM) eines Rotationszustandes von  $\text{H}^{35}\text{Cl}$  ( $\sigma = 0.30 \text{ nm}^2$ ) bei 298 K und  $1.01325 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ . Auf welchen Wert muss der Gasdruck reduziert werden, damit die Stoßverbreiterung kleiner wird als die Doppler-Verbreiterung? Betrachten Sie dabei die erste Rotationslinie und verwenden Sie für die Bindungslänge im HCl-Molekül den Wert  $r = 127.45 \text{ pm}$ .

**Aufgabe 2: Lebensdauererbreiterung**

Der elektronische Übergang  $3^2\text{S} \rightarrow 3^2\text{P}$  beim Natriumatom besteht aus einem Dublett mit Linien bei 589.00 nm und 589.59 nm. Berechnen Sie die relative Lebensdauererbreiterung  $\Delta\nu/\nu$  für die 589.00 nm-Linie unter der Annahme, dass die natürliche Lebensdauer elektronisch angeregter Alkalimetallatome in der Gasphase etwa  $\tau \approx 10^{-8} \text{ s}$  beträgt! Können die Signale mit einem Spektrometer hinreichender Auflösung getrennt werden?

**Aufgabe 3: FERMI's Goldene Regel und Dipolübergänge**

a) Was versteht man unter einem Dipolübergang und von welchen Faktoren hängt die Intensität eines solchen Übergangs ab? Formulieren Sie FERMI's Goldene Regel für Dipolübergänge und diskutieren Sie die Bedeutung der einzelnen Bestandteile der Gleichung.

b) Was versteht man unter dem Übergangsdipolmoment  $\mu_{if}$  und dem Einsteinkoeffizienten  $B_{if}$ ? Welcher Zusammenhang besteht zwischen diesen Größen?

**Aufgabe 4: Rotationspektroskopie**

Im Rotationspektrum vom CO erscheint die erste Linie ( $0 \rightarrow 1$ ) bei  $3.84 \text{ cm}^{-1}$ .

a) Berechnen Sie die Frequenz des Übergangs in GHz.

b) Wie groß ist die Bindungslänge von CO?

c) Bestimmen Sie das Besetzungsverhältnis  $N_J/N_0$  für das Rotationsniveau  $J = 7$  bei 78 K, 298 K und 1000 K!

d) Nehmen Sie an, dass das Rotationsniveau  $J = 1$  eine natürliche Lebensdauer von 300 s hat. Berechnen Sie die natürliche Linienbreite und vergleichen Sie diese mit der Dopplerverbreiterung bei 298 K!

e) Nennen Sie die Auswahlregeln für Rotationsübergänge linearer Moleküle!