

Fortgeschrittenen-Praktikum WS 2008/09

# **Versuch Nr. 34: Das Absorptionsspektrum des Jod-Moleküls**

Dominik Duda, Ernesto Ruge

23.10.2008

TU Dortmund

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>4</b>
2.1	Energieeigenwerte des Moleküls in Born-Oppenheimer-Näherung . . . . .	4
2.2	Rotation . . . . .	5
2.3	Schwingung . . . . .	6
2.3.1	Harmonische Schwingung . . . . .	6
2.3.2	Anharmonische Schwingung . . . . .	6
2.4	Elektronische Anregung . . . . .	8
2.5	Konstanten des $J_2$ Moleküls . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Aufbau und Durchführung</b>	<b>11</b>
3.1	Aufbau . . . . .	11
3.2	Durchführung . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Auswertung</b>	<b>13</b>
4.1	Bestimmen der Skalierung . . . . .	13
4.2	Auswertung der Spektren-Messung . . . . .	15
4.3	Morse-Potential auf Basis der Messung . . . . .	18
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>19</b>

# 1 Einleitung

Nach der Betrachtung eines Wasserstoffmoleküls im Anfängerpraktikum, bei welchem lediglich der Übergang von Elektronen auf einen höheren Zustand und die drei Freiheitsgrade der Bewegung möglich waren, soll in dem folgenden Versuch ein komplexeres Molekül betrachtet werden. Dieses hat durch Schwingung und Rotation zusätzliche Freiheitsgrade, welche sich im Spektrum bei Energien um 0.01 eV (Rotation) bis 0.1 eV (Schwingung) bemerkbar machen (siehe Abb. 1.1). Die Energien sind gequantelt, Schwingung und Rotation werden bei niedrigen Zuständen näherungsweise durch einen harmonischen Oszillator beschrieben, welcher bei höheren Zuständen anharmonisch wird.

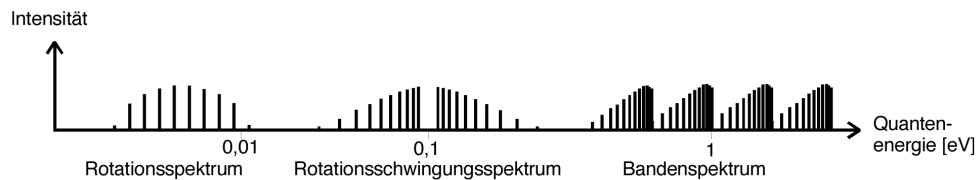


Abbildung 1.1: Typisches Spektrum eines Moleküls (nur quantitativ)

In Abb. 1.1 ist das zu erwartende Spektrum abgebildet. Hierbei ist bei der mittleren Rotationsschwingungsgruppe zu beachten, dass sich dort eine Feinstruktur der niedereenergetischen Rotation finden lässt. Die Bandenspektren sind eine Überlagerung von elektronischen Übergängen, Schwingung und Rotation.

## 2 Theorie

### 2.1 Energieeigenwerte des Moleküls in Born-Oppenheimer-Näherung

Die Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2.1)$$

eines Moleküls hat bedingt durch die Coulombkraft zwischen den einzelnen Komponenten folgende Form:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^k \frac{1}{M_i} \Delta_i - \frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{j=1}^k \Delta_j + V(\vec{R}_{1,\dots,k}, \vec{r}_{1,\dots,n}) \right) \psi(\vec{R}_{1,\dots,k}, \vec{r}_{1,\dots,n}) = E\psi(\vec{R}_{1,\dots,k}, \vec{r}_{1,\dots,n}) \quad (2.2)$$

Hier bei sind  $M_i$  die Massen der Kerne,  $R_i$  ihre Ortsvektoren, analog  $m_0$  die Masse der Elektronen und  $r_j$  ihre Ortsvektoren.  $E$  sei der Energieeigenwert des Moleküls,  $V(\vec{R}_{1,\dots,k}, \vec{r}_{1,\dots,n})$  das Coulombpotential, welches sich aus drei Anteilen zusammensetzt:

$$V(\vec{R}_{1,\dots,k}, \vec{r}_{1,\dots,n}) = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \sum_{i'=1}^k \frac{z_i z_{i'}}{|\vec{R}_i - \vec{R}_{i'}|}}_{i \neq i'} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{j'=1}^n \frac{1}{|\vec{r}_j - \vec{r}_{j'}|}}_{j \neq j'} - \sum_{i=1}^k \sum_{j'=1}^n \frac{z_i}{|\vec{r}_{j'} - \vec{R}_i|} \right) \quad (2.3)$$

Hierbei sind  $z_i$  die Ladungszahlen der Kerne. Der ersten beiden Terme beschreiben die Abstoßung der Kerne bzw. Elektronen untereinander, der dritte Term die Anziehung zwischen Kernen und Elektronen.

Die Gleichung 2.2 wird nun mit der Born-Oppenheimer-Näherung gelöst. Hierbei werden die Kerne als stationär genähert, was zu folgender Gleichung für die Elektronenwellenfunktion führt:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{1}{M_i} \Delta_j + \frac{e_0^2}{8\pi\epsilon_0} \underbrace{\sum_{i=1}^k \sum_{i'=1}^k \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_{j'}|}}_{i \neq i'} - \frac{e_0^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^k \sum_{j'=1}^n \frac{z_i}{|\vec{r}_{j'} - \vec{R}_i|} \right) = \gamma = E_{el}(\vec{R}_{1,\dots,k}, \gamma) \quad (2.4)$$

Gleichermassen kann die Kernbewegung separat beschrieben werden:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{1}{M_i} \Delta_j + \frac{e_0^2}{8\pi\epsilon_0} \underbrace{\sum_{i=1}^k \sum_{i'=1}^k}_{i \neq i'} \frac{z_i z_{i'}}{|\vec{R}_i - \vec{R}_{i'}|} + E_{el}(\vec{R}_{1,\dots,k}) \right) \eta = E\eta \quad (2.5)$$

Für den weiteren Verlauf soll nur Gleichung 2.5 betrachtet werden, da man hiermit verschiedene Konstanten des Moleküls berechnen kann. Zudem wird im Folgenden der Produktansatz

$$\eta = \eta_r \cdot \eta_s \quad (2.6)$$

gemacht, wobei  $\eta_r$  Wellenfunktion der Rotation und  $\eta_s$  der Schwingung darstellt.

## 2.2 Rotation

Zunächst soll die Rotationsbewegung betrachtet werden. Diese soll nur kurz angerissen werden, da sie für den Versuch selbst nicht benötigt wird und lediglich dem besseren Verständnis dient. Basis ist Gleichung 2.5, welche nach Einführung der reduzierten Masse  $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$  und dem Gleichgewichtsabstand  $r = R_0$  sowie der Nutzung von  $\Delta$  in Kugelkoordinaten bei einem zweiatomigen Molekül folgendermaßen aussieht:

$$\frac{\sin \vartheta}{\varphi} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{d\varphi}{d\varphi} \right) + \frac{R_0^2 2\mu E}{\hbar^2} \sin^2 \vartheta = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} \quad (2.7)$$

Hierbei wurde bereits der Produktansatz  $\eta_r(\vartheta, \varphi) = \Phi(\varphi)\Theta(\vartheta)$  verwendet. Aus Gleichung 2.7 extrahiert man nun:

$$\text{const} \Phi(\varphi) + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = 0 \quad (2.8)$$

Dies wird durch die Exponentialfunktion gelöst, womit die Wellenfunktion  $\Phi$  folgende Gestalt erhält:

$$\Phi(\varphi) = A e^{im\varphi} \quad \text{mit} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.9)$$

Hieraus lassen sich durch Einsetzen von 2.9 in 2.7 die Energieeigenwerte des quantenmechanischen Rotators mit raumfester und mit raumfreier Achse berechnen:

$$E_{\text{raumfest}}(m) = \hbar^2 \frac{1}{2\mu R_0^2} m^2 \quad E_{\text{raumfrei}}(J) = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \quad (2.10)$$

Hierbei ist  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$  und  $J = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Die Energiedifferenz zwischen benachbarten Niveaus ist somit:

$$\Delta E = E(J+1) - E(J) = \frac{\hbar^2}{I} (J+1) \quad (2.11)$$

Die Rotationsenergie eines zweiatomigen Moleküls wächst somit linear mit J und liegt in der Größenordnung  $10^{-5} eV$ .

## 2.3 Schwingung

### 2.3.1 Harmonische Schwingung

Die Schwingung eines zweiatomigen Moleküls lässt sich am besten in kartesischen Koordinaten beschreiben, wobei die Schwingung in x-Richtung erfolgt. Das Coulomb-Potential lässt sich nun um den Abstand  $R_0$  entwickeln:

$$U_C(R) = U_C(R_0) + (R - R_0) \left( \frac{dU_C}{dR} \right)_{R_0} + \frac{1}{2} (R - R_0)^2 \left( \frac{d^2U_C}{dR^2} \right)_{R_0} + \dots \quad (2.12)$$

Da bei  $R = R_0$  ein Minimum erreicht wird, verschwindet die erste Ableitung. Zurück bleibt die zweite Ableitung, welche einen harmonischen Oszillator darstellt. Mit Gleichung 2.5 und 2.12 sowie folgenden Definitionen:

$$x := R - R_0 \quad K := \left( \frac{d^2U_C}{dx^2} \right)_{x=0} \quad \mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \quad (2.13)$$

erhält man die typische Differentialgleichung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} K x^2 \right) \eta_S(x) = E \eta_S(x) \quad (2.14)$$

Dieser wird auf die bekannte Art und Weise gelöst:

$$E(n) = \hbar \sqrt{\frac{K}{\mu}} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.15)$$

Anschließend lassen sich die Nullpunktenergie  $E(0)$ , die Frequenz  $\omega_0$  sowie die Auswahlregel der Übergänge  $\Delta n$  berechnen:

$$E(0) = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{K}{\mu}} \quad \omega_0 := \sqrt{\frac{K}{\mu}} \quad \Delta n = \pm 1 \quad (2.16)$$

Im Schwingungsspektrum erscheint somit nur eine einzelne Linie des harmonischen Oszillators bei der Energie  $\hbar\omega_0$ .

### 2.3.2 Anharmonische Schwingung

Bei hohen Schwingungsenergien stellt sich die Näherung eines harmonischen Oszillators jedoch als unzureichend heraus, unter anderem das Phänomen der Dissoziation ist dadurch nicht erklärbar. Ein Molekül ist also ein anharmonischer Oszillator, welcher durch das sog. Morse-Potential näherungsweise beschrieben werden kann:

$$U_M(R) = U_0 \left( 1 - e^{-\beta(R-R_0)} \right) \quad (2.17)$$

Das Molekül kann mangels fehlender rücktreibender Kraft dissoziieren, weiterhin gilt für die Nullpunktsenergie  $E(0)$  und die Dissoziationsenergie  $U_D$ :

$$U_M(\infty) = U_0 \quad E(0) = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \quad U_D = U_0 - \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \quad (2.18)$$

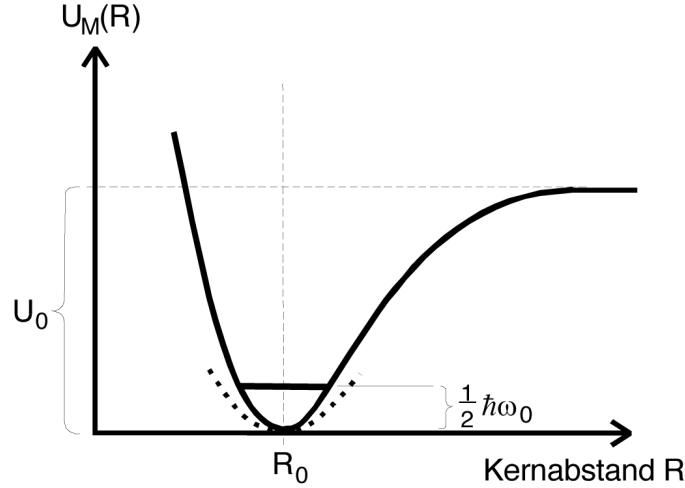


Abbildung 2.1: Das Morse-Potential des zweiatomigen Moleküls

Wenn man eine Reihenentwicklung der Gleichung 2.17 durchführt und diese mit 2.12 gleichsetzt sowie  $E(0)$  aus Gleichung 2.16 ausnutzt, erhält man  $\beta$ , welches die Öffnung der unter Abb. 2.1 gezeigten Kurve darstellt:

$$\beta \approx \sqrt{\frac{K}{2U_0}} = \omega_0 \sqrt{\frac{\mu}{2U_0}} \quad (2.19)$$

Zudem kann gezeigt werden, dass die Schrödingergleichung für ein zweiatomiges Molekül geschlossen lösbar ist und folgende Eigenwerte besitzt:

$$E = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega_0 x \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.20)$$

Der Parameter  $x$  wird als Anharmonizitätskonstante bezeichnet. Der Abstand benachbarter Niveaus ist gegeben durch:

$$E(n+1) - E(n) = \hbar\omega_0(1 - 2x(n+1)) \quad \text{mit} \quad n_m a x = \frac{1}{2x} - \frac{1}{2} \quad (2.21)$$

Der Zusammenhang zwischen den Molekülparametern ist:

$$\frac{\hbar\omega_0}{4x} = U_D \quad (2.22)$$

## 2.4 Elektronische Anregung

Im Gegensatz zu heteroatomaren Molekülen kann ein homoatomares Molekül nicht durch ein äußeres elektromagnetisches Feld zum Schwingen angeregt werden, da es kein Dipolmoment besitzt. Über den Umweg der elektronischen Anregung erhält man trotzdem eine Schwingung, da während des Elektronensprunges das Dipolmoment des Moleküls verändert wird.

Dieser Einstrahlungsvorgang eines Lichtquants ist in Abb. 2.2 dargestellt. Hierbei ist zu beachten, dass die Verschiebung von  $R_0$  zu  $R'_0$  durch die Lockerung der Bindung zustande kommt, die eine Anregung für gewöhnlich mit sich bringt. Folgende Auswahlregel hat Gültigkeit: Die Änderung des Gesamtdrehimpulses unterliegt folgender Beschränkung:  $\Delta J = 0, \pm 1$ , wobei der Übergang  $J = 0 \rightarrow J = 0$  nicht erlaubt ist. Alle möglichen Übergänge bezeichnet man als Bände, die drei Untersysteme als "Äste des Fortran-Diagramms". Letztere sind die verschiedenen J-Energieniveaus innerhalb eines n-Niveaus und werden in Abb 2.3 dargestellt.

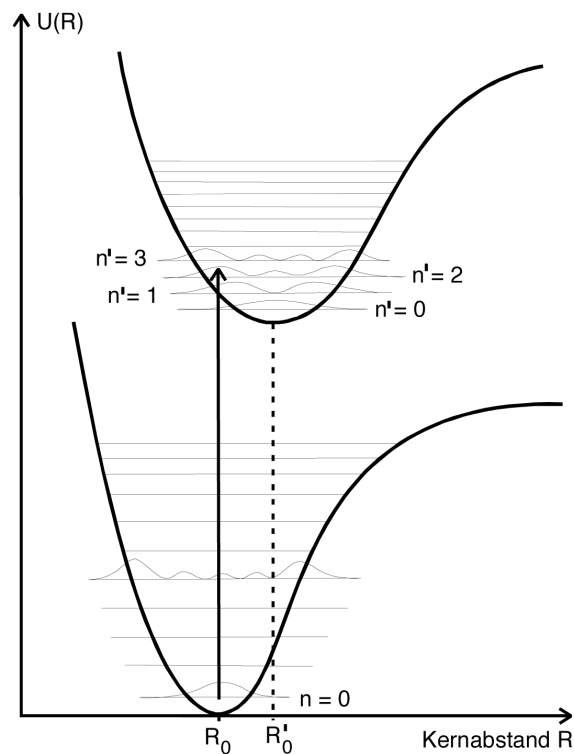


Abbildung 2.2: Das Morse-Potential für Grund- und ersten angeregten Zustand

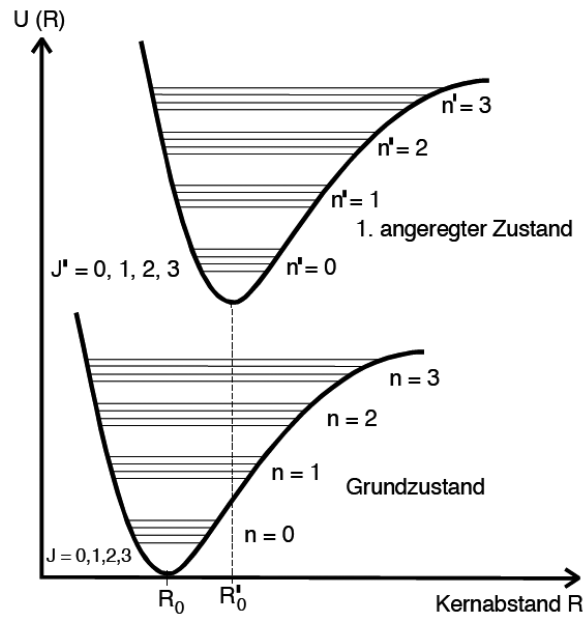


Abbildung 2.3: Potentialverlauf von Grundzustand und erstem angeregten Zustand

Für Übergänge zwischen  $n \rightarrow n'$  existieren keine Auswahlregeln mehr, die Übergänge sind jedoch unterschiedlich wahrscheinlich. Wenn man allerdings die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit von  $R$  wie in Abb. 2.2 darstellt, kann man sehen, dass die Maxima mit steigendem  $n$  immer weiter zum Rand "wandern". Da Elektronensprünge ausschließlich senkrecht vollzogen werden, sind also die Übergänge am wahrscheinlichsten, an denen das Maximum übereinanderliegt. Dieses Prinzip wird auch Franck-Condon-Prinzip genannt.

Die Quantenlinie  $h\nu$  einer Linie im Molekülspektrum ist gegeben durch:

$$h\nu = \Delta E_{el} + \Delta E_{Osc} + \Delta E_{rot} \quad \text{mit} \quad \Delta E_{el} \gg \Delta E_{Osc} \gg \Delta E_{rot} \quad (2.23)$$

## 2.5 Konstanten des $J_2$ Moleküls

Da man das Schwingungsspektrum des  $J_2$  durch sein verschwindendes Dipolmoment nicht direkt beobachten kann, muss man den Umweg über die elektrische Anregung gehen, um die Konstanten des Moleküls zu messen. Schickt man also das Licht einer Halogenlampe durch eine Kuvette mit  $J_2$  Gas und betrachtet das Absorptionsspektrum mit einem Spektralapparat geeigneter Auflösung, so kann man gerade die Übergänge zwischen den verschiedenen Schwingungsniveaus betrachten. Eine Linie im Absorptionsspektrum ist also eine komplette Bande, dessen Energie mit Gleichung 2.20 beschrieben wird. Um die Parameter  $\hbar\omega_0$  und  $x$  können aus den Übergangsenergien

$\Delta E(n \rightarrow n')$  bestimmt werden:

$$\Delta E(n \rightarrow n') = \hbar\omega'_0 \left( n' + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega'_0 x' \left( n' + \frac{1}{2} \right)^2 - \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_0 x \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (2.24)$$

Sowohl  $n$  als auch  $n_0$  sind zunächst unbekannt. Da bei Raumtemperatur die Besetzung  $N(E)$  der Energieniveaus jedoch der Boltzmannverteilung entspricht, kann man davon ausgehen, dass die Anregung aus dem Grundzustand  $n = 0$  erfolgt. Es können jedoch insbesondere bei höheren Temperaturen Übergänge von  $n = 1$  oder  $n = 2$  beobachtet werden, welche in der Nähe der Linien von  $n = 0$  liegen, jedoch von diesen getrennt werden müssen. Im Bereich von 500 bis 540 nm sind jedoch lediglich Übergänge von  $n = 0$  zu sehen, da die Besetzung der Energieniveaus der Boltzmannverteilung entspricht, welche mit wachsendem  $n$  durch die Proportionalität zu  $\exp\left(\frac{-E(n)}{k_0 T}\right)$  sehr schnell abnimmt. Bei höheren Temperaturen bzw. höheren Frequenzen sind auch Absorptionslinien von  $n=1$  oder  $n=2$  aus zu finden, weswegen man Zimmertemperatur und den oben genannten Wellenlängenbereich zur Messung und Auswertung verwendet.

Ein weiteres Problem betrifft die Zuordnung der Quantenzahlen zu den gemessenen Energiewerten. Der Übergang von  $n = 0 \rightarrow n' = 0, 1, 2, \dots$  ist nicht zu erkennen, weswegen  $n'$  in Gleichung 2.24 zunächst unbekannt ist und mit den Messergebnissen bestimmt werden muss. Man kann dies jedoch aus dem gemessenen Spektrum  $\Delta E(0 \rightarrow 0)$  entnehmen. Man kann die Übergangsenergie folgendermassen zerlegen:

$$\Delta E(0 \rightarrow n;) = n'^2(-x'E'_0) + n'(E'_0 - x'E'_0) + \Delta E(0 \rightarrow 0) \quad (2.25)$$

Die Variable  $n'$  ist zunächst unbekannt, somit ordnet man einer Linie zunächst eine unbekannte Quantenzahl  $n^*$  mit  $n^* < n'$  zu:

$$\Delta E(0 \rightarrow n^*) = n^{*2}A + n^*B + \Gamma \quad (2.26)$$

Die unbekannt Parameter in 2.26 lassen sich durch eine quadratische Ausgleichsrechnung bestimmen. Mittels Koeffizientenvergleich zwischen 2.25 und 2.26 lassen sich dann auch  $x'$  und  $E'_0$  berechnen, indem man 2.25 in

$$n' = n^* + y \quad (2.27)$$

einsetzt. Die Variable  $y$  ist hierbei eine konstante ganze Zahl  $> 0$ . Es folgt:

$$A = -x'E'_0 \quad (2.28)$$

$$B = E'_0(1 - x') + 2Ay \quad (2.29)$$

$$\Gamma = E(0 \rightarrow 0) - Ay^2 + By \quad (2.30)$$

Somit lassen sich nach Berechnung von  $x'$  und  $E'_0$  des ersten angeregten Zustandes mit Gleichung 2.22 und 2.19 auch die Konstanten  $U_D$ ,  $\beta$  und schließlich  $K$  berechnen.

# 3 Aufbau und Durchführung

## 3.1 Aufbau

Prinzipiell sind bereits weite Teile des Versuches auf Abbildung 3.1 zu sehen. Die Küvette mit  $J_2$ -Gas wird mit einer Halogenlampe durchleuchtet, welche für  $500nm \leq \lambda \leq 650nm$  theoretisch eine annähernd konstante Intensität haben sollte (was jedoch in der Messung der Untergrundstrahlung widerlegt wird). Das Licht wird dann in einen Doppelmonochromator geleitet, wo ein Sekundärelektronenvervielfacher das Signal verstärkt und ein Nanoamperemeter die Intensität in Abhängigkeit der Wellenlänge schließlich detektieren kann. Ein Nanoamperemeter mit einem angeschlossenen x-y-Schreiber ermöglicht das Aufzeichnen des Spektrums.

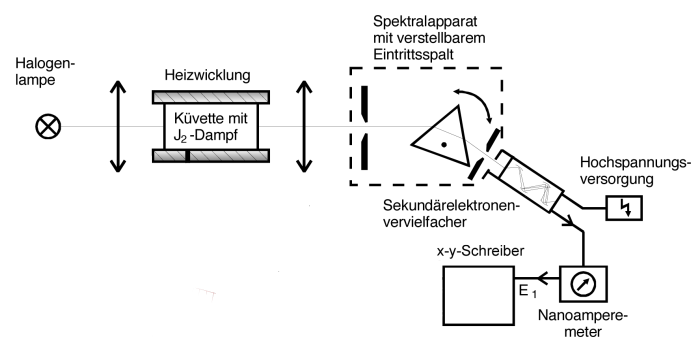


Abbildung 3.1: Das Morse-Potential des zweiatomigen Moleküls

Der Doppelmonochromator wird von einem Motor angetrieben, so dass die Wellenlängen gleichmäßig durchlaufen werden können, wenngleich auch nicht linear, so dass die Skala zunächst geeicht werden muss. Gleichmaßen ist auch die Spaltbreite des Doppelmonochromators entscheidend für die Präzision der Messung, weswegen die Messung mit verschiedenen Spaltbreiten durchgeführt werden muss.

## 3.2 Durchführung

Es werden insgesamt sechs Messungen durchgeführt. Die Spannung am Sekundärelektronenvervielfacher ist bei allen Messungen  $U = (1730 \pm 5)V$ . Die Umdrehungsgeschwindigkeit des Motors liegt konstant bei  $(0.2 \pm 0.02)Hz$ , die Geschwindigkeit des x-y-Schreibers konstant bei der Einstellung  $(60 \pm 6) cm/min$  mit der Ausnahme der ersten Messung. Der durchfahrene Wellenlängenbereich ist ebenfalls bis auf den ersten Versuch  $480nm \leq \lambda \leq 680nm$

- Messung 1: In dieser wird die x-Skala mit einer HgCd-Dampflampe geeicht. Es wird der Bereich von  $480nm - 700nm$  durchfahren. Der x-y-Schreiber wird auf  $15 \pm 1.5$  gestellt, was sich als zu langsam für die präzise Messung des Spektrums herausstellt, sich aber gut eignet, um die Skala der x-Achse zu berechnen. Die Spaltöffnung beträgt  $(0.2 \pm 0.02)mm$ , die Jod-Küvette wird selbstverständlich aus dem Strahlengang entfernt und die HgCd-Dampflampe so nah wie möglich an den Doppelmonochromator positioniert.
- Messung 2: Die x-Skala wird abermals mit einer HgCd-Dampflampe geeicht, in dieser Messung jedoch mit den Einstellungen, welche auch bei den Spektrum-Messungen verwendet wurden. Die Spaltöffnung beträgt wieder  $(0.2 \pm 0.02)mm$ , der Aufbau entspricht Messung 1.
- Messung 3: Um die folgenden drei Messungen auswerten zu können, muss in dieser Messung das Hintergrundspektrum aufgezeichnet werden. Hierzu wird die Halogenlampe in dem Abstand aufgestellt, in dem sie in den drei folgenden Versuchen ebenfalls stehen wird. Lediglich die  $J_2$ -Küvette wird entfernt. Die Spaltbreite beträgt  $(0.2 \pm 0.02)mm$ , bei der Messung gibt es einen Skalensprung von  $0.2\mu A$  auf  $0.5\mu A$ .
- Messung 4: Dies ist die erste der drei  $J_2$ -Spektren-Messungen. Die  $J_2$  Küvette wird zwischen die Halogen-Lampe und dem Doppelmonochromator eingesetzt, die Spaltbreite wird auf  $(0.2 \pm 0.02)mm$  eingestellt und das oben genannte Spektrum durchfahren.
- Messung 5: Die Spaltbreite wird auf  $(0.15 \pm 0.015)mm$  reduziert, ansonsten wird die Messung analog zu Messung 4 durchgeführt.
- Messung 6: Hier erfolgt eine Spaltbreitenreduktion auf  $(0.1 \pm 0.01)mm$ , ansonsten läuft die Messung wiederum analog zu Messung 4 ab.

Bei den Messungen 3-6 war es notwendig, einen Skalensprung bei ca. 550 nm durchzuführen. Bei Messung 6 war sogar ein weiterer Skalensprung bei 610 nm nötig. Dies entsteht durch die Veränderung der Signalstärke über mehr als eine Größenordnung, kann aber ignoriert werden, da es lediglich auf die Positionen der Peaks auf der x-Achse ankommt, nicht auf die tatsächliche Höhe der Peaks. Bei der Spaltbreite wurde ein Fehler von 10% angenommen, da der Fehler auf dem Gerät nicht weiter spezifiziert wurde.

# 4 Auswertung

## 4.1 Bestimmen der Skalierung

Zunächst soll die Skalierung der x-Achse mit Hilfe der während der Messung erstellten Markierungen sowie den Linien der HgCd-Lampe bestimmt werden. Die Markierungen befinden sich in Tabelle 4.1.

Tabelle 4.1: Positionen der Marker

Position (in cm)	Wellenlaenge (in nm)
$5,7 \pm 0,1$	480
$13,4 \pm 0,1$	490
$20,4 \pm 0,1$	500
$27,1 \pm 0,1$	510
$33,4 \pm 0,1$	520
$44,5 \pm 0,1$	540
$54,6 \pm 0,1$	560
$63,2 \pm 0,1$	580
$71,0 \pm 0,1$	600
$78,1 \pm 0,1$	620
$84,6 \pm 0,1$	640
$90,3 \pm 0,1$	660
$95,5 \pm 0,1$	680

Zudem werden die Linien des HgCd-Spektrums gemessen und in Tabelle 4.2 aufgelistet.

Tabelle 4.2: Positionierung der HgCd-Spektrallinien

Position (in cm)	Wellenlaenge (in nm)	Intensitaet	Element
$6.5 \pm 0.1$	485.57	80	Hg
$15.4 \pm 0.1$	491.61	80	Hg
$26.9 \pm 0.1$	508.58	1000	Cd
$31.3 \pm 0.1$	512.85	100	Hg
$48.4 \pm 0.1$	546.07	1100	Hg
$62.7 \pm 0.1$	576.96	240	Hg
$64.2 \pm 0.1$	579.07	280	Hg
$86.4 \pm 0.1$	643.85	2000	Cd

Bei dem Vergleich der Werte beider Messmethoden fällt auf, dass diese nicht vollständig übereinstimmen. Es kann aber davon ausgegangen werden, dass die Spektrallinien von HgCd korrekt sind, weswegen die Hilfsmarkierungen im Folgenden nicht weiter beachtet werden sollen. Eine grafische Umsetzung ist in Abb. 4.1 zu sehen, Abb. 4.2 zeigt den Unterschied zwischen den Werten beider Messmethoden.

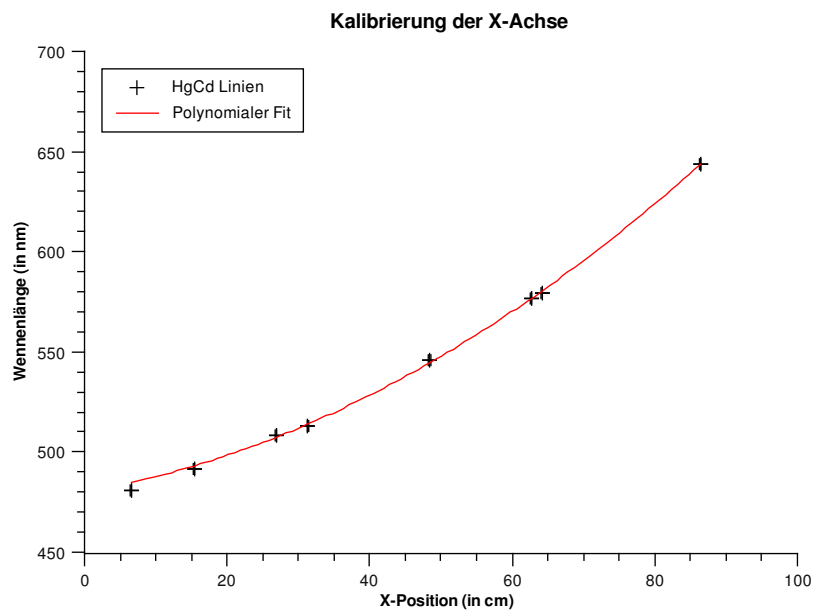


Abbildung 4.1: Kalibrierung der x-Achse

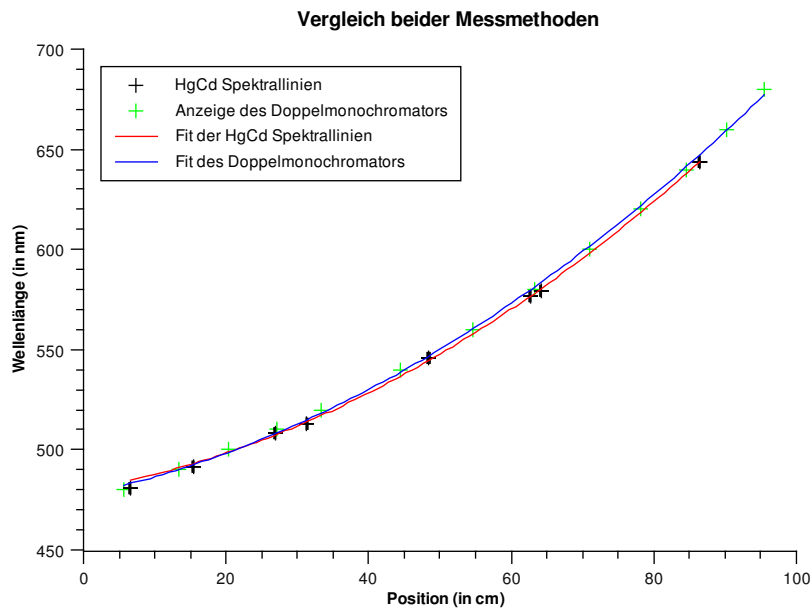


Abbildung 4.2: Kalibrierung der x-Achse

Ein polynominaler Fit zweiter Ordnung ergibt folgende Gleichung:

$$\lambda(x) = ax^2 + bx + c \quad \text{mit} \quad a = 0,015 \pm 0,001; \quad b = 0,6 \pm 0,1; \quad c = 480 \pm 2 \quad (4.1)$$

## 4.2 Auswertung der Spektren-Messung

Um die gemessenen Daten auszuwerten, müssen zunächst die Positionen der Peaks notiert werden. Dies findet sich in Tabelle 4.3, bei welcher zu beachten ist, dass die Position in Bezug auf den 0-Punkt der Kalibrierung angegeben wurde. Die Messunsicherheit wurde auf Basis des Fehlerfortpflanzungsgesetzes berechnet, zudem wird die Energie  $\Delta E$  nach folgender Formel berechnet:

$$\Delta E = \hbar \frac{c}{\lambda} \quad (4.2)$$

Die Fehlerformeln haben folgende Gestalt:

$$u_\lambda = \sqrt{(x^2)^2 \sigma_a^2 + x^2 u_b^2 + \sigma_c^2 + (2ax + b)^2 \sigma_x^2} \quad u_{\Delta E} = \sqrt{\left(-\hbar \frac{c}{\lambda^2}\right)^2 \sigma_\lambda^2} \quad (4.3)$$

Zusätzlich wurden in der Tabelle 4.3 den einzelnen Messwerten willkürliche Quantenzahlen  $n^*$  zugeordnet. Grafik 4.2 trägt dann  $\Delta E$  gegen  $n^*$  auf und bestimmt  $A, B, \Gamma$

Tabelle 4.3: Spektrum des  $J_2$  Molekuels

Position (in cm)	Wellenlaenge (in nm)	n*	$\Delta E$ (in eV)
21.7 ± 0.1	500 ± 3	39	2.48 ± 0.02
21.9 ± 0.1	501 ± 3	38	2.48 ± 0.02
22.2 ± 0.1	501 ± 3	37	2.47 ± 0.02
22.55 ± 0.1	502 ± 3	36	2.47 ± 0.02
22.85 ± 0.1	502 ± 3	35	2.47 ± 0.02
23.2 ± 0.1	502 ± 3	34	2.47 ± 0.02
23.6 ± 0.1	503 ± 3	33	2.47 ± 0.02
24 ± 0.1	503 ± 4	32	2.46 ± 0.02
24.45 ± 0.1	504 ± 4	31	2.46 ± 0.02
24.95 ± 0.1	505 ± 4	30	2.46 ± 0.02
25.45 ± 0.1	505 ± 4	29	2.45 ± 0.02
25.95 ± 0.1	506 ± 4	28	2.45 ± 0.02
26.55 ± 0.1	507 ± 4	27	2.45 ± 0.02
27.15 ± 0.1	508 ± 4	26	2.44 ± 0.02
27.75 ± 0.1	509 ± 4	25	2.44 ± 0.02
28.4 ± 0.1	510 ± 4	24	2.43 ± 0.02
29.05 ± 0.1	510 ± 4	23	2.43 ± 0.02
29.7 ± 0.1	511 ± 4	22	2.42 ± 0.02
30.4 ± 0.1	512 ± 4	21	2.42 ± 0.02
31.2 ± 0.1	514 ± 4	20	2.41 ± 0.02
31.95 ± 0.1	515 ± 4	19	2.41 ± 0.02
32.8 ± 0.1	516 ± 4	18	2.4 ± 0.02
33.7 ± 0.1	518 ± 5	17	2.4 ± 0.02
34.55 ± 0.1	519 ± 5	16	2.39 ± 0.02
35.4 ± 0.1	520 ± 5	15	2.38 ± 0.02
36.35 ± 0.1	522 ± 5	14	2.38 ± 0.02
37.25 ± 0.1	524 ± 5	13	2.37 ± 0.02
38.2 ± 0.1	525 ± 5	12	2.36 ± 0.02
39.15 ± 0.1	527 ± 5	11	2.35 ± 0.02
40.2 ± 0.1	529 ± 5	10	2.34 ± 0.02
41.25 ± 0.1	531 ± 6	9	2.34 ± 0.02
42.35 ± 0.1	533 ± 6	8	2.33 ± 0.02
43.45 ± 0.1	535 ± 6	7	2.32 ± 0.03
44.55 ± 0.1	537 ± 6	6	2.31 ± 0.03
45.7 ± 0.1	539 ± 6	5	2.3 ± 0.03
46.95 ± 0.1	542 ± 6	4	2.29 ± 0.03
48.15 ± 0.1	544 ± 6	3	2.28 ± 0.03
49.35 ± 0.1	546 ± 7	2	2.27 ± 0.03
50.65 ± 0.1	549 ± 7	1	2.26 ± 0.03

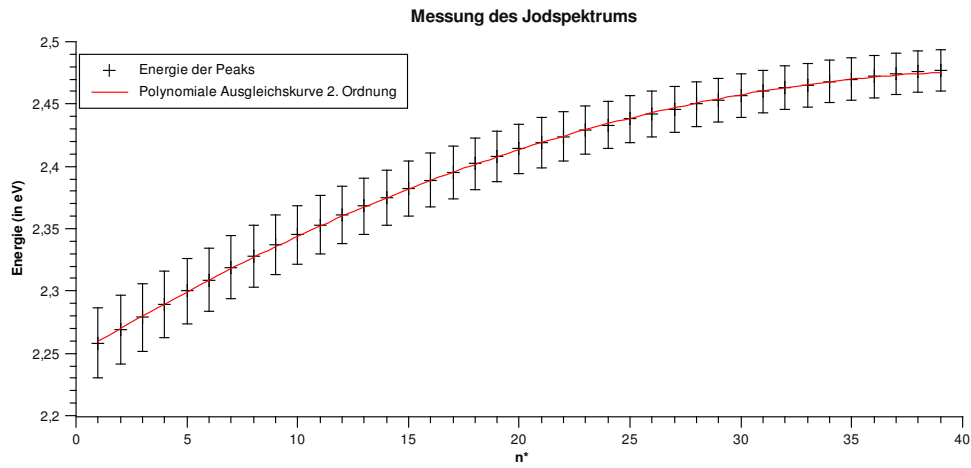


Abbildung 4.3: Messung des Jodspektrums

Durch die gewichtete quadratische Ausgleichsrechnung erhält man folgende Werte für  $A, B, \Gamma$ :

$$A = (-1.28 \pm 0.01) \cdot 10^{-4} \quad (4.4)$$

$$B = (1.080 \pm 0.005) \cdot 10^{-2} \quad (4.5)$$

$$\Gamma = 2.2487 \pm 4 \cdot 10^{-4} \quad (4.6)$$

Hieraus und aus  $E(0 \rightarrow 0) = (1.92 \pm 0.4) \text{ eV}$  lässt sich dann  $y \in \mathbb{N}$  berechnen:

$$y = \frac{B}{2A} + \sqrt{\frac{B^2}{4A^2} + \frac{E(0 \rightarrow 0) - \Gamma}{A}} = 24 \pm 2 \quad (4.7)$$

Nun lassen sich auch die weiteren Werte  $E'_0$ ,  $x'$ ,  $U_D$ ,  $U_0$  berechnen:

$$E'_0 = B - 2Ay = (0.0169 \pm 0.0006) \text{ eV} \quad (4.8)$$

$$x' = -\frac{A}{E'_0} = 0.0076 \pm 0.0002 \quad (4.9)$$

$$U_D = \frac{\hbar\omega}{4x} = (0.556 \pm 0.029) \text{ eV} \quad (4.10)$$

$$U_0 = U_D + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 = (0.564 \pm 0.029) \text{ eV} \quad (4.11)$$

Mit der Kernmasse von Jod  $M = 126.90447u$  ergibt sich dann auch die reduzierte Masse  $\mu = 1.05 \cdot 10^{-25}$ . Man kann schliesslich  $\beta$  und  $K$  ausrechnen:

$$\beta \approx \omega_0 \sqrt{\frac{\mu}{2U_0}} = (1.96 \pm 0.07) \cdot 10^{10} \frac{1}{\text{m}} \quad (4.12)$$

$$K = \omega_0^2 \mu = (69 \pm 5) \frac{1}{\text{s}^2} \quad (4.13)$$

### 4.3 Morse-Potential auf Basis der Messung

Mit den in Kapitel 4.3 berechneten Daten kann nun das Morse-Potential gezeichnet werden:

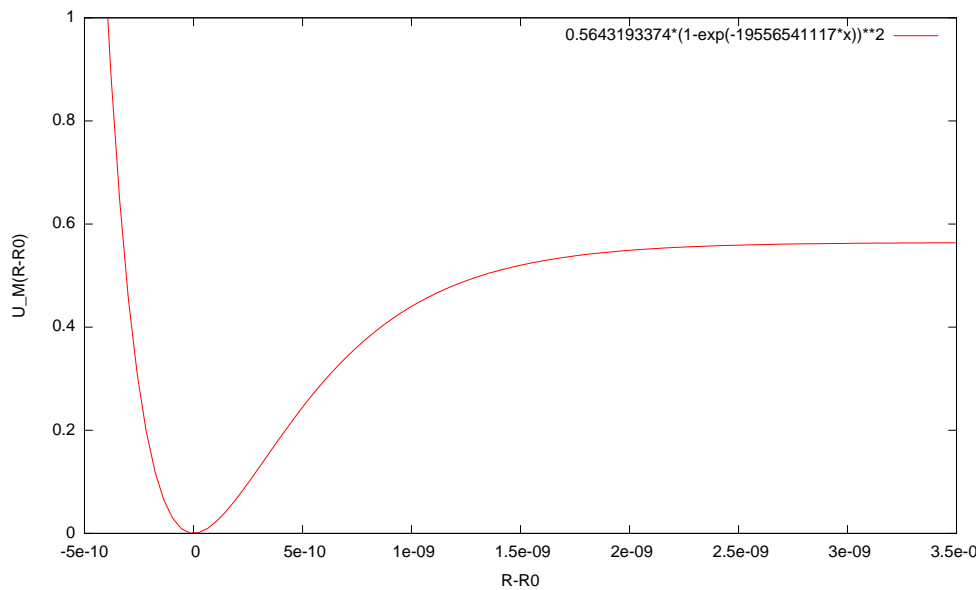


Abbildung 4.4: Messung des Jodspektrums

## 5 Zusammenfassung

Zusammenfassend lässt sich das Experiment trotz widriger Bedingungen als Erfolg werten. Die Messunsicherheiten halten sich in Grenzen, wenngleich sie durch verschiedene Probleme während des Messvorganges höher sind, als es mit der Methode prinzipiell möglich wäre. Zuletzt ist aber das Morse-Potential in seiner theoretisch berechneten Form auch mit den gemessenen Werten deutlich zu sehen.

Eine Fehlerquelle lässt sich durch die verschiedenen Längen der Strecken zwischen der 480nm und der 680 nm Markierung je nach Messung zeigen. Bei der Auswertung wurden die gemessenen x-Werte entsprechend an die Kalibrierungsmessung angepasst, jedoch deutet dieses Verhalten darauf hin, dass sich die Motoren des x-y Schreibers und des Doppelmonochromators nicht mit konstanter Geschwindigkeit drehten. Die Nichtlinearität bringt einen nicht ohne weiteres in Formeln fassenden Fehler in die Messung. Dies ist besonders deutlich in Messung 3 zu sehen, wo trotz oben genannter Korrektur der Peak bei ca. 508 nm deutlich verschoben ist.

Zudem geht die Formel für die in Tabelle 17 berechneten Fehlern von unkorrelierten Messunsicherheiten aus. Dies ist jedoch nicht der Fall, da die in Formel 4.1 berechneten Werte hochgradig voneinander abhängig sind. Auf diese Art sind die doch recht hohen Fehler der in Grafik 4.3 dargestellten Messwerte zu erklären.