

# 1 Auswertung

Aus dem aufgenommenen Spektrum in Abbildung 3.1 wurden die Progressionen für  $v'' = 0$ ,  $v'' = 1$  und  $v'' = 2$  abgelesen. Eine Zuordnung gelang mit den im Skript gegebenen Schwingungsquantenzahlen und den zugehörigen Wellenlängen der gesuchten Progressionen. Die erhaltenen Daten wurden in den Tabellen 1.1, 1.2 und 1.3 zusammengetragen.

**Tabelle 1.1:** Aus dem Spektrum in Abbildung 3.1 erhaltene Progression mit  $v'' = 0$ . Die Daten wurden per Hand mit Hilfe von Igor Pro 6.37 ausgelesen. Der Fehler für die Wellenzahl ergab sich über den relativen Fehler der erhaltenen Wellenlängen. Der Fehler für die Wellenlänge wurde mit  $0.25 \text{ cm}^{-1}$  durch den Abstand zu nächsten Punkt veranschlagt.

$v'$	$\nu \pm \Delta\nu$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	$\lambda \pm \Delta\lambda$ [nm]	$\Delta\tilde{\nu} \pm \Delta(\Delta\tilde{\nu})$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]
14	$17315 \pm 8$	$577.5 \pm 0.25$	
15	$17415 \pm 8$	$574.2 \pm 0.25$	$100.00 \pm 0.09$
16	$17512 \pm 8$	$571.0 \pm 0.25$	$97.00 \pm 0.08$
17	$17606 \pm 8$	$568.0 \pm 0.25$	$94.00 \pm 0.08$
18	$17700 \pm 8$	$565.0 \pm 0.25$	$94.00 \pm 0.08$
19	$17796 \pm 8$	$561.9 \pm 0.25$	$96.00 \pm 0.09$
20	$17887 \pm 8$	$559.1 \pm 0.25$	$91.00 \pm 0.08$
21	$17976 \pm 8$	$556.3 \pm 0.25$	$89.00 \pm 0.08$
22	$18062 \pm 8$	$553.6 \pm 0.25$	$86.00 \pm 0.08$
23	$18150 \pm 8$	$551.0 \pm 0.25$	$88.00 \pm 0.08$
24	$18231 \pm 9$	$548.5 \pm 0.25$	$81.00 \pm 0.07$
25	$18314 \pm 9$	$546.0 \pm 0.25$	$83.00 \pm 0.08$
26	$18393 \pm 9$	$543.7 \pm 0.25$	$79.00 \pm 0.07$
27	$18472 \pm 9$	$541.4 \pm 0.25$	$79.00 \pm 0.07$
28	$18549 \pm 9$	$539.1 \pm 0.25$	$77.00 \pm 0.07$
29	$18620 \pm 9$	$537.1 \pm 0.25$	$71.00 \pm 0.07$
30	$18688 \pm 9$	$535.1 \pm 0.25$	$68.00 \pm 0.06$
31	$18761 \pm 9$	$533.0 \pm 0.25$	$73.00 \pm 0.07$
32	$18828 \pm 9$	$531.1 \pm 0.25$	$67.00 \pm 0.06$
33	$18893 \pm 9$	$529.3 \pm 0.25$	$65.00 \pm 0.06$
34	$18957 \pm 9$	$527.5 \pm 0.25$	$64.00 \pm 0.06$
35	$19017 \pm 9$	$525.8 \pm 0.25$	$60.00 \pm 0.06$
36	$19076 \pm 9$	$524.2 \pm 0.25$	$59.00 \pm 0.06$
37	$19130 \pm 9$	$522.7 \pm 0.25$	$54.00 \pm 0.05$
38	$19185 \pm 9$	$521.2 \pm 0.25$	$55.00 \pm 0.05$
39	$19238 \pm 10$	$519.8 \pm 0.25$	$53.00 \pm 0.05$
40	$19288 \pm 10$	$518.5 \pm 0.25$	$50.00 \pm 0.05$

**Tabelle 1.2:** Aus dem Spektrum in Abbildung 3.1 erhaltene Progression mit  $v'' = 1$ . Die Daten wurden per Hand mit Hilfe von Igor Pro 6.37 ausgelesen. Der Fehler für die Wellenzahl ergab sich über den relativen Fehler der erhaltenen Wellenlängen. Der Fehler für die Wellenlänge wurde mit  $0.25 \text{ cm}^{-1}$  durch den Abstand zu nächsten Punkt veranschlagt.

$v'$	$\nu \pm \Delta\nu$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	$\lambda \pm \Delta\lambda$ [nm]	$\Delta\tilde{\nu} \pm \Delta(\Delta\tilde{\nu})$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]
14	$17101 \pm 7$	$584.8 \pm 0.25$	
15	$17201 \pm 7$	$581.4 \pm 0.25$	$100.00 \pm 0.09$
16	$17300 \pm 7$	$578.0 \pm 0.25$	$99.00 \pm 0.09$
17	$17395 \pm 8$	$574.9 \pm 0.25$	$95.00 \pm 0.08$
18	$17488 \pm 8$	$571.8 \pm 0.25$	$93.00 \pm 0.08$
19	$17582 \pm 8$	$568.8 \pm 0.25$	$94.00 \pm 0.08$
20	$17673 \pm 8$	$565.8 \pm 0.25$	$91.00 \pm 0.08$
21	$17760 \pm 8$	$563.1 \pm 0.25$	$87.00 \pm 0.08$
22	$17852 \pm 8$	$560.2 \pm 0.25$	$92.00 \pm 0.08$
23	$17936 \pm 8$	$557.5 \pm 0.25$	$84.00 \pm 0.08$
24	$18020 \pm 8$	$554.9 \pm 0.25$	$84.00 \pm 0.08$
25	$18102 \pm 8$	$552.4 \pm 0.25$	$82.00 \pm 0.07$
26	$18179 \pm 8$	$550.1 \pm 0.25$	$77.00 \pm 0.07$
27	$18262 \pm 8$	$547.6 \pm 0.25$	$83.00 \pm 0.08$
28	$18338 \pm 8$	$545.3 \pm 0.25$	$76.00 \pm 0.07$

**Tabelle 1.3:** Aus dem Spektrum in Abbildung 3.1 erhaltene Progression mit  $v'' = 2$ . Die Daten wurden per Hand mit Hilfe von Igor Pro 6.37 ausgelesen. Der Fehler für die Wellenzahl ergab sich über den relativen Fehler der erhaltenen Wellenlängen. Der Fehler für die Wellenlänge wurde mit  $0.25 \text{ cm}^{-1}$  durch den Abstand zu nächsten Punkt veranschlagt.

$v'$	$\nu \pm \Delta\nu$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	$\lambda \pm \Delta\lambda$ [nm]	$\Delta\tilde{\nu} \pm \Delta(\Delta\tilde{\nu})$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]
12	$16678 \pm 7$	$599.6 \pm 0.25$	
13	$16786 \pm 7$	$595.7 \pm 0.25$	$108.00 \pm 0.09$
14	$16890 \pm 7$	$592.1 \pm 0.25$	$104.00 \pm 0.09$
15	$16984 \pm 7$	$588.8 \pm 0.25$	$94.00 \pm 0.08$
16	$17087 \pm 7$	$585.2 \pm 0.25$	$103.00 \pm 0.09$
17	$17188 \pm 7$	$581.8 \pm 0.25$	$101.00 \pm 0.09$
18	$17282 \pm 7$	$578.6 \pm 0.25$	$94.00 \pm 0.08$
19	$17375 \pm 8$	$575.5 \pm 0.25$	$93.00 \pm 0.08$
20	$17472 \pm 8$	$572.3 \pm 0.25$	$97.00 \pm 0.08$
21	$17558 \pm 8$	$569.5 \pm 0.25$	$86.00 \pm 0.08$

Die Daten der  $v'' = 0$  wurden gemäß Gleichung ?? in einem Birge-Diagramm aufgetragen.

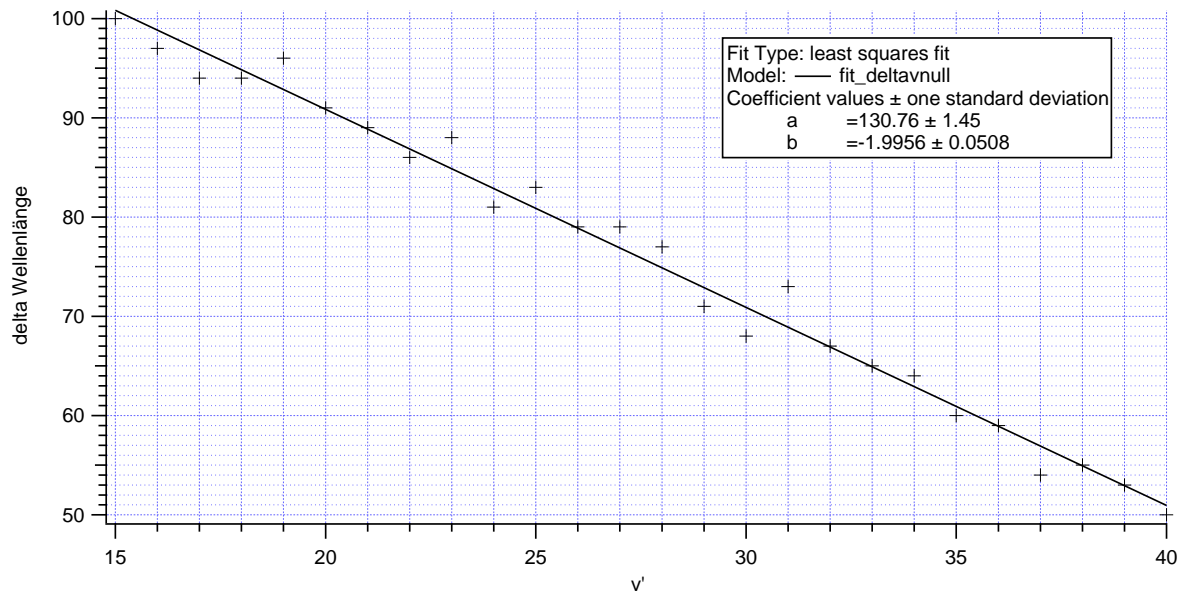


Abbildung 1.1: linearer Plot  $v''=0$

### Berechnungen der Dissoziationsenergie und der Schwingungskonstanten des angeregten Zustandes

Wie in dem Birge-Diagramm in Abbildung 1.1 zu sehen, wurden die Differenz der Wellenzahlen benachbarter Übergänge über die Schwingungsquantenzahl  $v'$  der  $v''=0$  Progression aufgetragen. Daraus ergibt sich folgende lineare Funktion:

$$f(\tilde{\nu}_{v'} - \tilde{\nu}_{v'-1}) = m - n \cdot v' = 130.76 - 1.9956 \cdot v' \quad (1)$$

So findet sich also nach Gleichung 1 für die harmonische Schwingungskonstante  $\omega_e'$  ein Wert von  $130 \pm 1.5 \text{ cm}^{-1}$  und für die Anharmonizitätskonstante  $\omega_e'x_e'$  ein Wert von

$$2 \cdot \omega_e'x_e' = 1.9956 \quad \Rightarrow \quad \omega_e'x_e' = 1.0 \pm 0.3 \text{ cm}^{-1} \quad (2)$$

Der Schnittpunkt mit der x Achse, also der Wert für  $v'_{max}$ , bei dem das Molekül dissoziiert, ergibt sich durch Nullsetzen der Funktion.

$$\begin{aligned} 0 &= 130.76 - 1.9956 \cdot v'_{max} \\ 1.9956 \cdot v'_{max} &= 130.76 \\ v'_{max} &= \frac{130.76}{1.9956} = 65 \end{aligned} \quad (3)$$

und der Fehler

$$\Delta v'_{max} = (\delta m + \delta n) \cdot 65 = 3 \quad (4)$$

Mit einer über Python geschriebene Prozedur konnte nun die Summe aller möglichen Differenzen der benachbarten Übergänge nach Gleichung 5 von  $v' = 0$  bis  $v' = 65$  ermittelt werden, woraus sich schließlich die Dissoziationsenergie ergibt

$$D_0^B = \sum_{v=1}^{65} (\tilde{v}_v - \tilde{v}_{v-1}) = 4350 \text{ cm}^{-1} \quad (5)$$

mit

$$\Delta D_0^B = \sum_{v=1}^{65} \left( \left| \frac{\delta f(\tilde{v}_v - \tilde{v}_{v-1})}{\delta n} \right| \cdot \Delta n + \left| \frac{\delta f(\tilde{v}_v - \tilde{v}_{v-1})}{\delta m} \right| \cdot \Delta m \right) = 200 \text{ cm}^{-1} \quad (6)$$

### Berechnungen der Dissoziationsenergie und der Schwingungskonstante des Grundzustandes

Für die Dissoziationsenergie des Grundzustandes muss als erstes der energetische Abstand des  $v'' = 0 \rightarrow v' = 65$  Übergangs bestimmt werden. Es wurde als Ausgangspunkt der Übergang  $\tilde{v}_{(v''=0 \rightarrow v'=14)}$  gewählt:

$$\tilde{v}_{(v''=0 \rightarrow v'=65)} = \tilde{v}_{(v''=0 \rightarrow v'=14)} + \sum_{v=15}^{65} (\tilde{v}_v - \tilde{v}_{v-1}) = 20010 \text{ cm}^{-1} \quad (7)$$

mit einem Fehler von

$$\Delta \tilde{v}_{(v''=0 \rightarrow v'=65)} = \Delta \tilde{v}_{(v''=0 \rightarrow v'=14)} + \Delta \sum_{v=15}^{65} (\tilde{v}_v - \tilde{v}_{v-1}) = 180 \text{ cm}^{-1} \quad (8)$$

Nun ergibt sich für das Dissoziationslimit  $D_0^0$  des Grundzustandes mit der aus dem Skript gegebenen Anregungsenergie  $\Lambda = 7602.970 \text{ cm}^{-1}$

$$D_0^0 = \tilde{v}_{(v''=0 \rightarrow v'=max)} - \Lambda = (20010 - 7602.970) \text{ cm}^{-1} = 12410 \text{ cm}^{-1} \quad (9)$$

und dem dazugehörigen Fehler

$$\Delta D_0^0 = \Delta \tilde{v}_{(v''=0 \rightarrow v'=65)} - \Lambda = 180 \text{ cm}^{-1} \quad (10)$$

Die harmonische Schwingungskonstante  $\omega_e''$  kann über die Differenz der ersten beiden benachbarten Schwingungsniveaus des elektronischen Grundzustandes ermittelt

werden.

$$\omega_e'' = \tilde{\nu}_{(v''=0 \rightarrow v'=n)} - \tilde{\nu}_{(v''=1 \rightarrow v'=n)} \quad (11)$$

So ergibt sich für  $v' = 20$

$$\omega_e'' = (17887 - 17673) \text{ cm}^{-1} = 214 \text{ cm}^{-1} \quad (12)$$

mit einem Fehler von

$$\Delta\omega_e'' = \Delta\tilde{\nu}_{(v''=0 \rightarrow v'=n)} + \Delta\tilde{\nu}_{(v''=1 \rightarrow v'=n)} = (8 + 8) \text{ cm}^{-1} = 16 \text{ cm}^{-1} \quad (13)$$

## 2 Zusammenfassung

Es wurde das Photoabsorptionsspektrum von molekularem Iod aufgenommen und daraus die in Tabelle 2.1 aufgetragenen Molekularen Konstanten von Iod bestimmt.

**Tabelle 2.1:** Zusammenfassung der Ergebnisse aus dem Versuch zur Photoabsorption von molekularem Iod. Die experimentellen, sowie die Literaturwerte sind in der Einheit  $[\text{cm}^{-1}]$  angegeben.

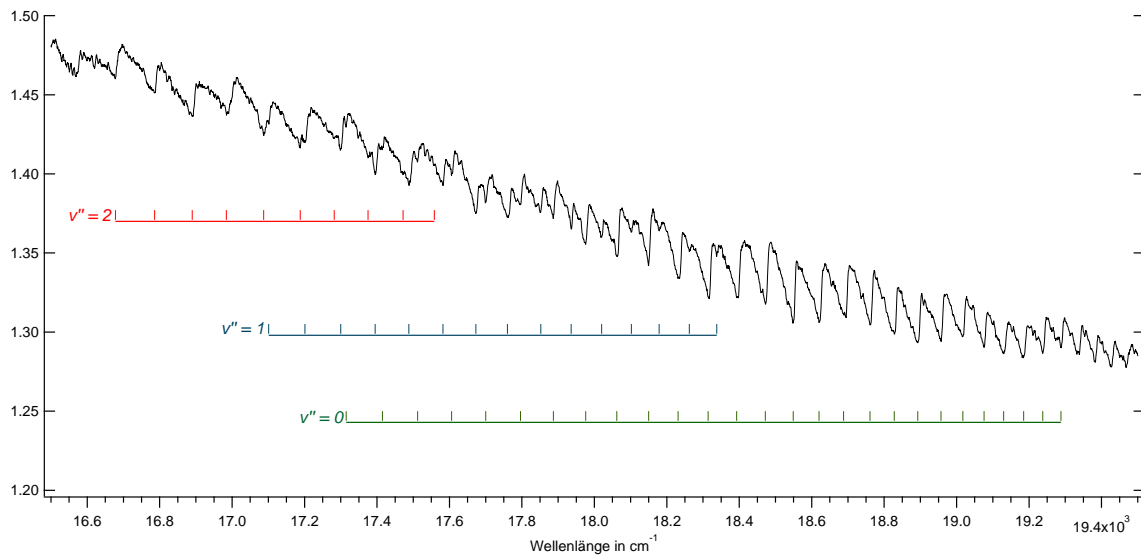
Parameter	Molekulare Konstanten von Iod		
	Experimentell	Literatur <sup>[1]</sup>	% Abweichung
$\omega_e'$	$130 \pm 1.5$	125	4
$\omega_e x_e'$	$1.0 \pm 0.3$	0.744	35
$\omega_e''$	$214 \pm 16$	213.695	0.2
$D_0^B$	$12410 \pm 180$	12440.9	0.3
$D_0^0$	$4350 \pm 200$	4391	1

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die experimentell gefunden Werten gut mit den Literaturwerten übereinstimmen.

## Literatur

- [1] E. L. Lewis, C. W. P. Palmer, J. L. Cruickshank, *American Journal of Physics* **1994**, 62, 350–356.

### 3 Rohdaten



**Abbildung 3.1:** Ausschnitt des aufgenommenes Spektrum von 16500 bis 19500 Wellenzahlen [ $\text{cm}^{-1}$ ]. Die verschiedenen gefunden Progressionen wurden farblich kenntlich gemacht. Die Abbildung wurde mit Igor Pro 6.37 erstellt.