

Robert Strothmann, 5040218  
Jonas Schulz, 5153815  
David Ueberle, 4903184

E-Mail 1, E-Mail 2, ueberleda@zedat.fu-berlin.de

## **Laborbericht / Versuchsprotokoll**

### Versuchsnummer - Versuchstitel

Datum der Versuchsdurchführung:  
Datum der Protokolleinreichung:  
Assistent/in:  
Dateiname:

Mit der Einreichung wird versichert, dass das Protokoll von den oben eingetragenen Personen in gemeinschaftlicher Arbeit angefertigt worden ist und dass sämtliche Quellen, die zur Erstellung des Protokolls genutzt wurden, im 8. Teil des Protokolls (Literatur) kenntlich gemacht worden sind.

# 1 Einleitung

## 2 Durchführung

Die aus Versuch S1 gewonnenen Daten, der Berechnungen der Energien von Chlorwasserstoff und Kohlenmonoxid in Abhängigkeit von dem Abstand der Kerne wurden nun mittels Igor Ausgewertet. Hierfür wurden die Daten eingelesen, in die Einheiten Hartee und Meter umgerechnet und anschließend nahe dem Minimum mit der Morsefunktion intrapoliert. Hierbei wurden die Rotationskonstanten und die Anharmonizität unter Verwendung der Massen und der Gleichgewichtsabstände erhalten. Hieraus wurde ein Rotationsschwingungsspektrum simuliert.

## 3 Auswertung

Vorgehen bei der Erstellung der Graphik

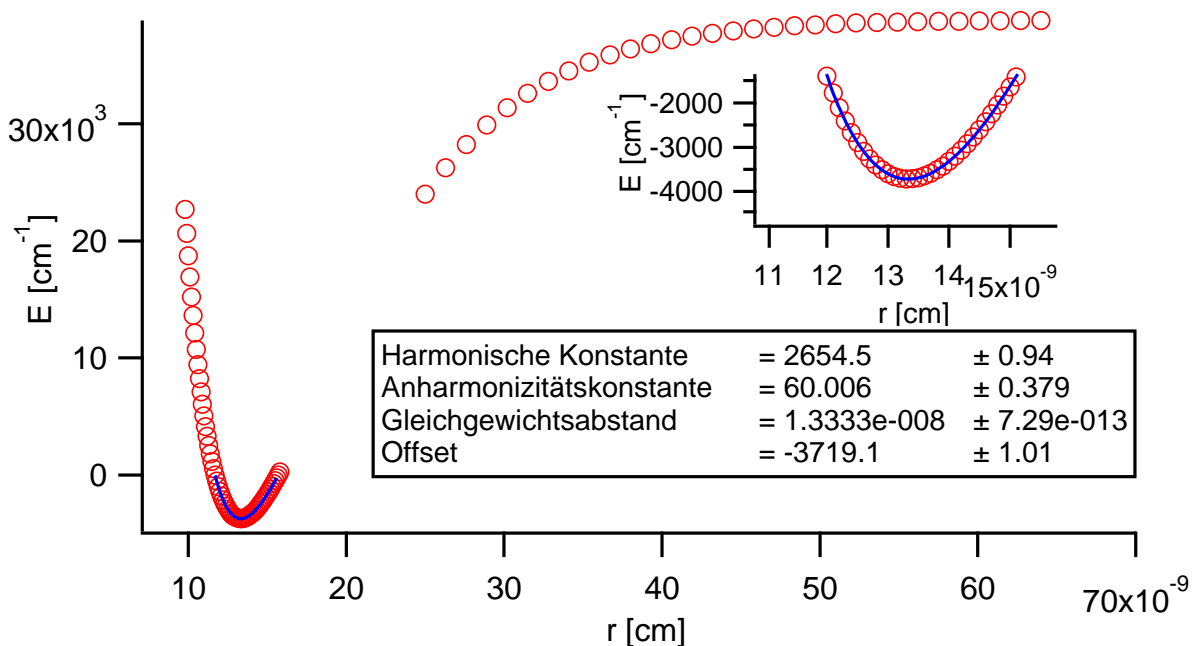


Abbildung 3.1: mit IgorPro gemacht. HCL über morsefit

$$D_e \approx \frac{\tilde{\nu}_e^2}{4\tilde{\nu}_e x_e} \quad (1)$$

$$D_e \approx \frac{2654.5^2}{4 \cdot 60.006} \text{ cm}^{-1} \approx 29\,356.94 \text{ cm}^{-1} \quad (2)$$

- 29356.940347631902729101

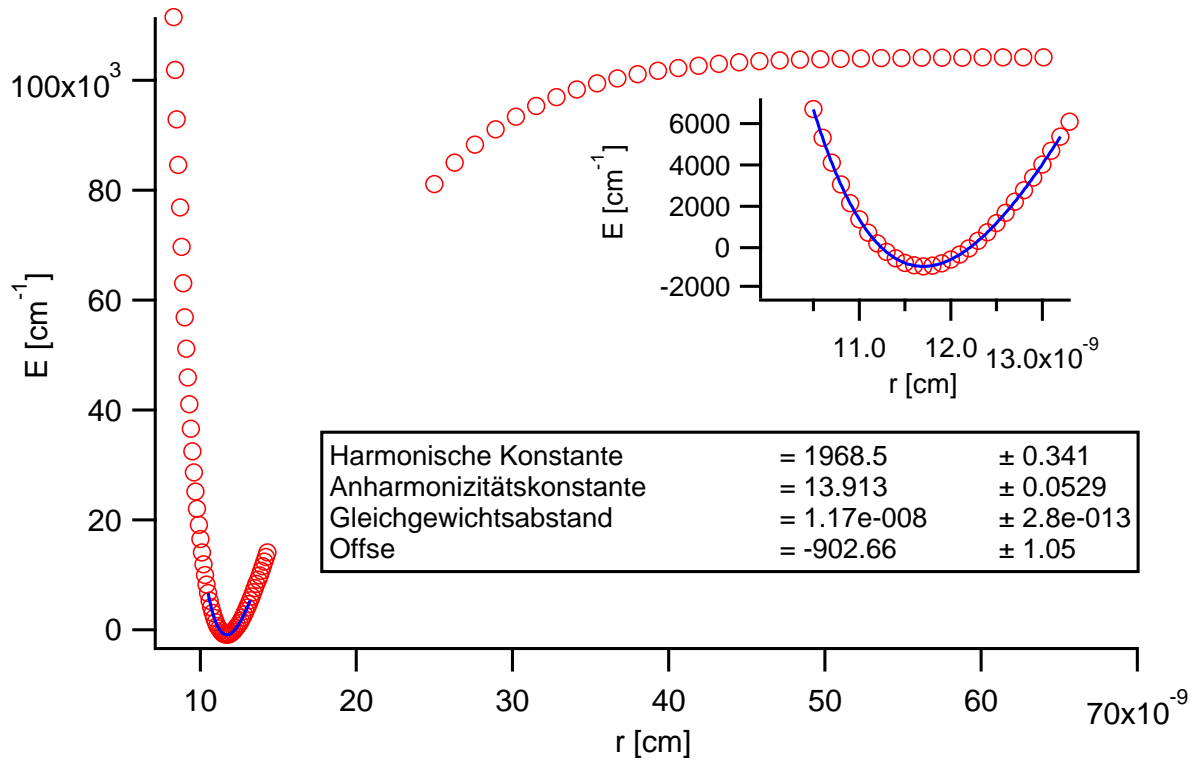


Abbildung 3.2: mit IgorPro gemacht. CO über morsefit

## 4 Fehlerrechnung und Konstante B

Die Rotationskonstante  $B$ , sowie der Fehler  $\Delta B$  berechnen sich gemäß den Gleichungen :::

$$B = \frac{\hbar}{4 \cdot \pi \cdot c \cdot \mu \cdot r_e^2} \quad (3)$$

$$= konst. \cdot \frac{1}{\mu \cdot r_e^2} \quad (4)$$

$$\Delta B = \left| \frac{\delta B}{\delta r_e} \right| \cdot \Delta r_e = konst. \cdot \left| \frac{-2}{\mu \cdot r_e^3} \right| \cdot \Delta r_e \quad (5)$$

Dabei werden zur Vereinfachung die Naturkonstante in einer Konstante  $konst.$  in Gleichung ::: zusammengefasst.

$$konst. = \frac{1.054\,571\,800 \cdot 10^{-34} \text{ kg m s}^{-1}}{4 \cdot 3.14159265359 \cdot 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}} = 2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m} \quad (6)$$

### HCl

Für HCl ergibt sich somit, unter Verwendung der durch den Fit ausgegeben Gleichgewichtsabstand  $r_e$  und dem dazugehörigen absoluten Fehler  $\Delta r_e$

$$r_e = 1.3333 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 1.3333 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (7)$$

$$\Delta r_e = 7.29 \cdot 10^{-13} \text{ cm} = 7.29 \cdot 10^{-13} \text{ m} \quad (8)$$

,sowie der in Gleichung ::: berechneten reduzierten Masse  $\mu$

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{m(H) \cdot m(Cl)}{m(H) + m(Cl)} \\ \mu &= \frac{1 \cdot 35}{1 + 35} \text{ u} = \frac{35}{36} \text{ u} = 1.614\,412\,705 \cdot 10^{-27} \text{ kg}\end{aligned}\quad (9)$$

die in Gleichung ::: berechnete Rotationskonstante  $B$

$$B = \frac{2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m}}{1.614\,412\,705 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot 1.3333 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2} = \text{m}^{-1} = \text{cm}^{-1} \quad (10)$$

,sowie der absolute Fehler  $\Delta B$  gemäß Gleichung 11.

$$\begin{aligned}\Delta B &= \left| -2 \cdot \frac{2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m}}{1.614\,412\,705 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot 1.3333 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3} \right| \cdot 7.29 \cdot 10^{-15} \text{ m} \\ &= \end{aligned}\quad (11)$$

## CO

Für CO ergibt sich somit, unter Verwendung der durch den Fit ausgegeben Gleichgewichtsabstand  $r_e$  und dem dazugehörigen absoluten Fehler  $\Delta r_e$

$$r_e = 1.17 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 1.17 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (12)$$

$$\Delta r_e = 2.8 \cdot 10^{-13} \text{ cm} = 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (13)$$

sowie der in Gleichung ::: berechneten reduzierten Masse  $\mu$

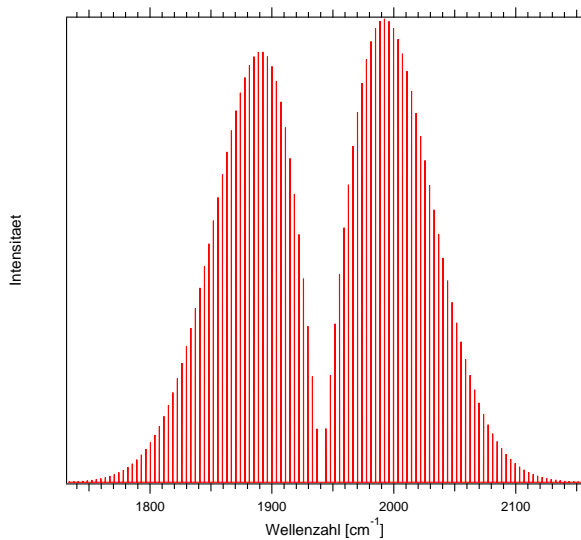
$$\begin{aligned}\mu &= \frac{m(H) \cdot m(Cl)}{m(H) + m(Cl)} \\ \mu &= \frac{12 \cdot 16}{12 + 16} \text{ u} = \frac{48}{7} \text{ u} = 1.138\,655\,165 \cdot 10^{-26} \text{ kg}\end{aligned}\quad (14)$$

die in Gleichung ::: berechnete Rotationskonstante  $B$

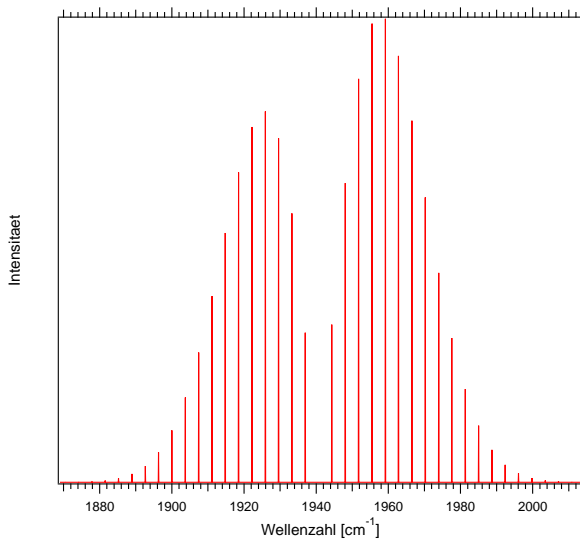
$$B = \frac{2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m}}{1.136\,551\,65 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \cdot 1.17 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2} = 210.50 \text{ m}^{-1} = 2.10 \text{ cm}^{-1} \quad (15)$$

,sowie der absolute Fehler  $\Delta B$  gemäß der Gleichung :::

$$\begin{aligned}\Delta B &= \left| -2 \cdot \frac{2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m}}{1.136\,551\,65 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \cdot 1.17 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3} \right| \cdot 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m} \\ &= 0.01178849883\end{aligned}\quad (16)$$



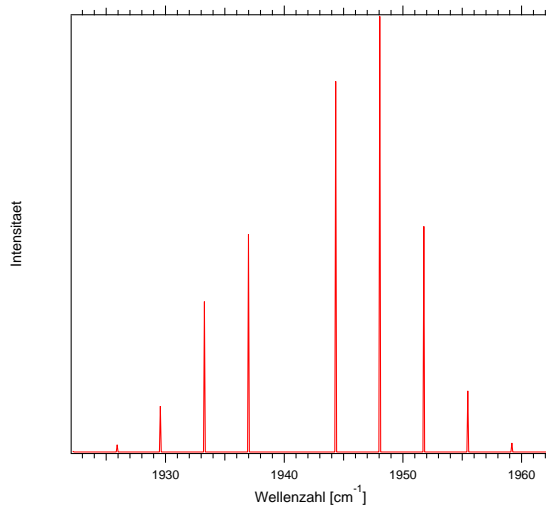
**Abbildung 5.1:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1000 Kelvin



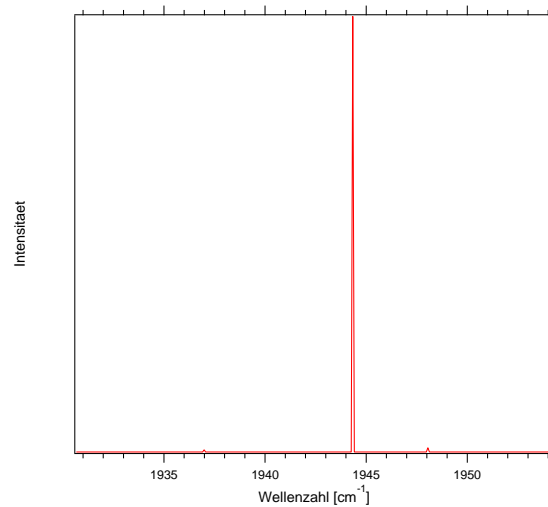
**Abbildung 5.2:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 100 Kelvin

**Abbildung 5.3:** CO 1000 und 100 Kelvin

## 5 Roationsschwingungsspektrum von HCL und CO bei verschiedenen T

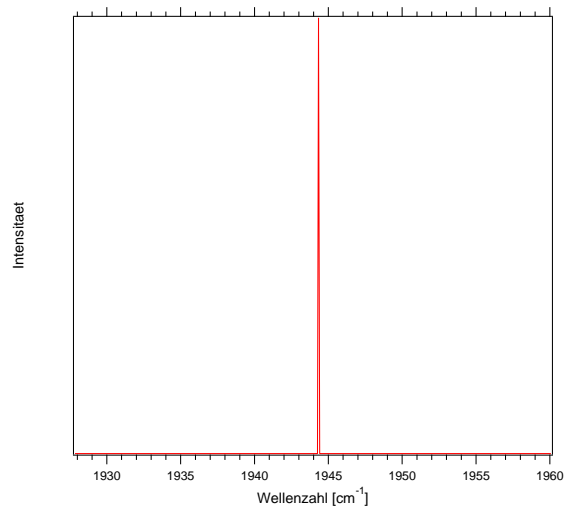


**Abbildung 5.4:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 K



**Abbildung 5.5:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1 K

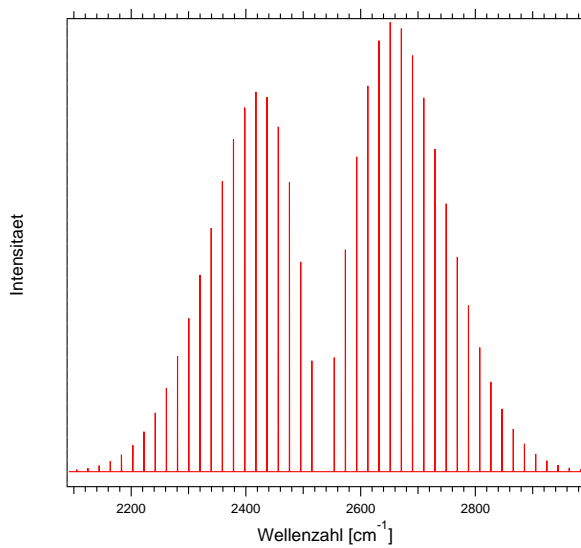
**Abbildung 5.6:** CO 10 und 1 Kelvin



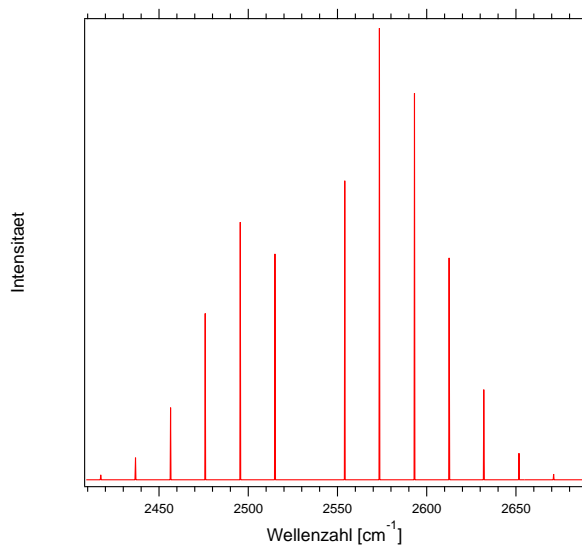
**Abbildung 5.7:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 K

**Abbildung 5.8:** CO 10 und 1 Kelvin

Bilden Sie daraus einen Satz Abbildungen und erklären Sie die Beobachtung! Wieviel Linien erhält man für  $T=0.01\text{K}$ ? Zu welchem Zweig gehört sie? (-1 geht nicht daher +1)

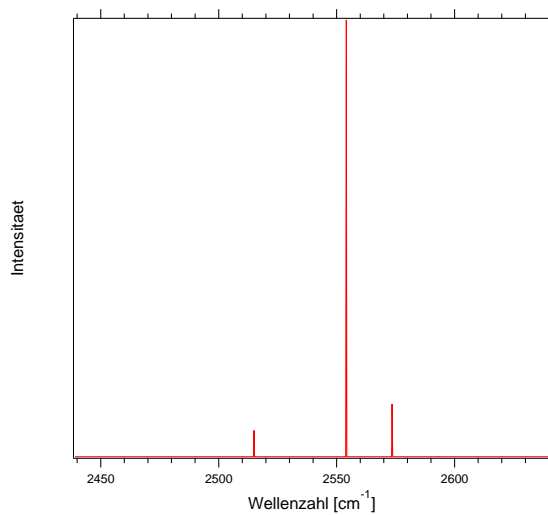


**Abbildung 5.9:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1000 Kelvin

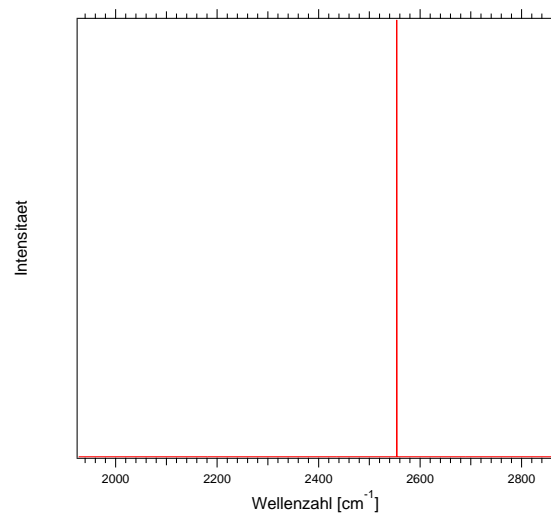


**Abbildung 5.10:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 100 Kelvin

**Abbildung 5.11:** HCL 1000 und 100 Kelvin

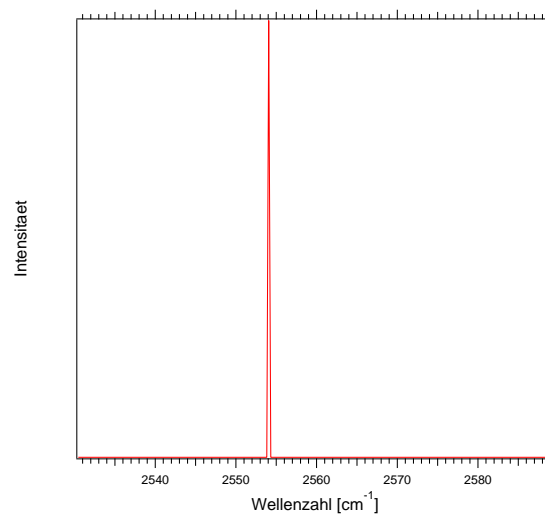


**Abbildung 5.12:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 K



**Abbildung 5.13:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1 K

**Abbildung 5.14:** HCL 10 und 1 Kelvin



**Abbildung 5.15:** berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 K

**Abbildung 5.16:** HCL 10 und 1 Kelvin

## 6 Rohdaten