

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

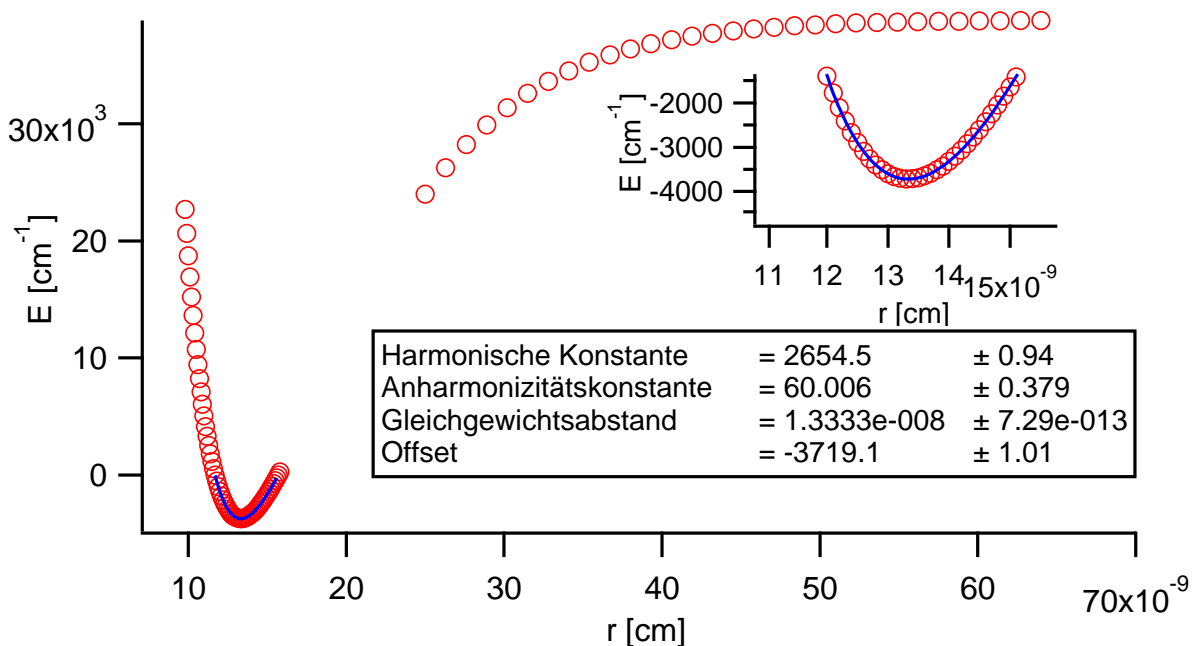


Abbildung 3.1: mit IgorPro gemacht. HCL über morsefit

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

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

- 29356.940347631902729101

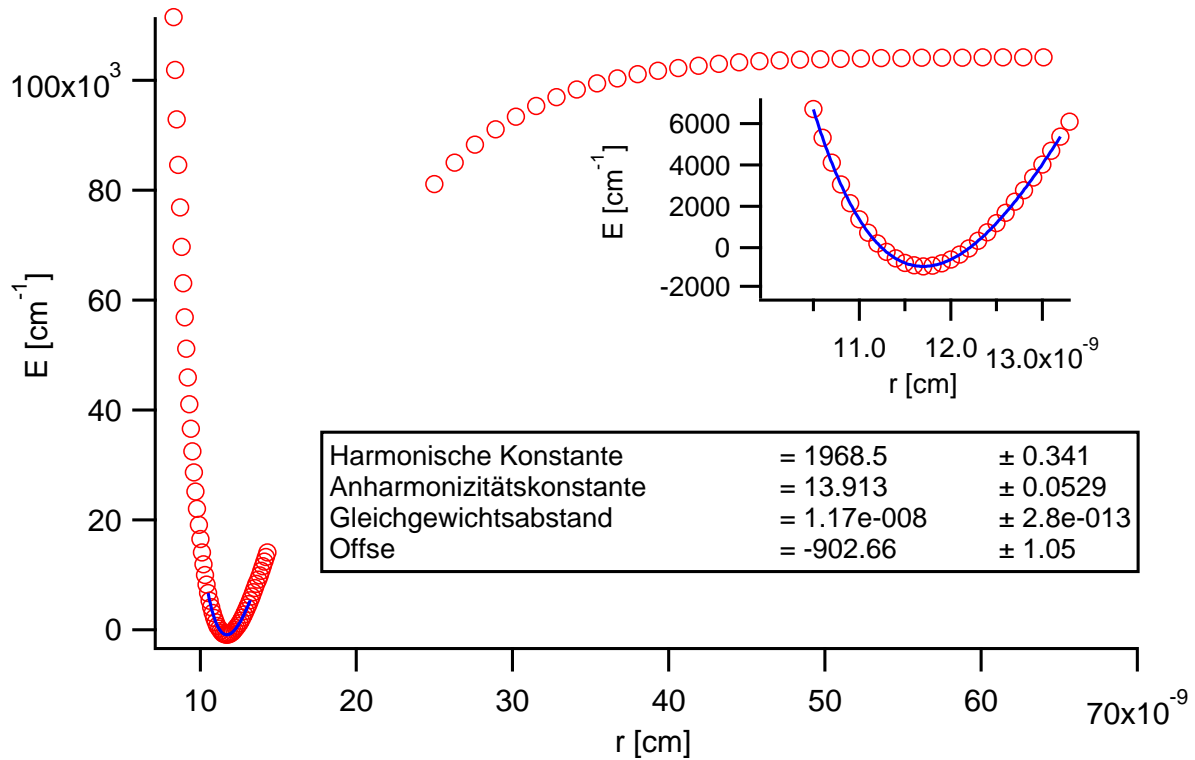


Abbildung 3.2: mit IgorPro gemacht. CO über morsefit

4 Fehlerrechnung und Konstante B

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

$$\Delta B = \left| \frac{\delta B}{\delta r_e} \right| \cdot \Delta r_e = \left| -2 \cdot \frac{\hbar}{4 \cdot \pi \cdot c \cdot \mu} \cdot r_e^{-3} \right| \cdot \Delta r_e \quad (4)$$

$$\mu = \frac{m(H) \cdot m(Cl)}{m(H) + m(Cl)} \quad (5)$$

mit

$$\Delta r_e = 2.8 \cdot 10^{-13} \text{ cm} = 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (6)$$

und

$$r_e = 1.17 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 1.17 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (7)$$

und

$$\mu = \frac{1 \cdot 35}{1 + 35} \text{ kg} = \frac{35}{36} \text{ kg} = 0.972 \text{ kg} \quad (8)$$

eingesetzt in die Gleichung 2 ergibt sich somit:

$$B = \frac{1.054\,571\,800 \cdot 10^{-34} \text{ kg m s}^{-1}}{4 \cdot 3.14159265359 \cdot 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1} \cdot 0.972 \text{ kg}} \cdot 1.17 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-2} \quad (9)$$

$$= \quad (10)$$

$$\Delta B = \left| -2 \cdot \frac{1.054\,571\,800 \cdot 10^{-34} \text{ kg m s}^{-1}}{4 \cdot 3.14159265359 \cdot 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1} \cdot 0.972 \text{ kg}} \right| \cdot 1.17 \cdot 10^{30} \text{ m}^{-3} \cdot 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (11)$$

$$= \quad (12)$$

Anpassung der Parameter an die Morsefunktion

Rechnerische Bestimmung der molekularen Konstanten aus der Morsefunktion

Tabelarische Auflistung für CO und HCl + Literaturdaten

Prognose des Rotationsschwingungsspektrum von HF und HCl.

5 Rotationsschwingungsspektrum von HCL und CO bei verschiedenen T

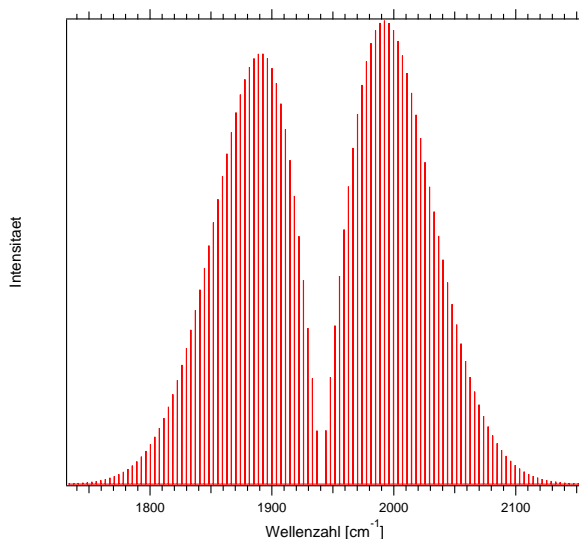


Abbildung 5.1: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1000 Kelvin

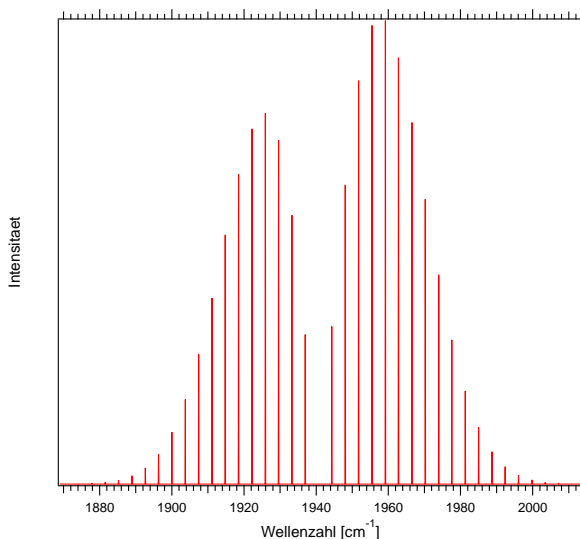


Abbildung 5.2: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 100 Kelvin

Abbildung 5.3: CO 1000 und 100 Kelvin

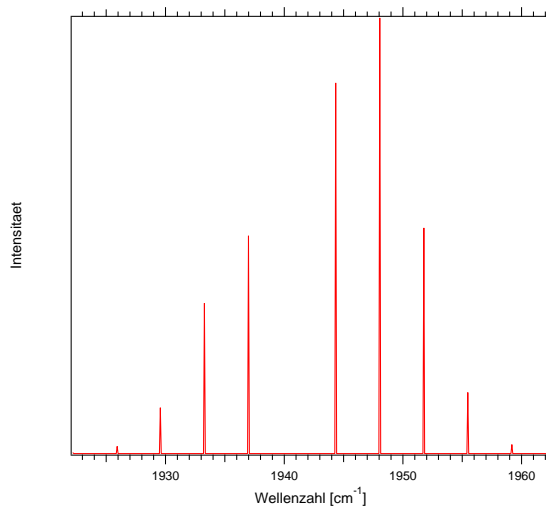


Abbildung 5.4: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 K

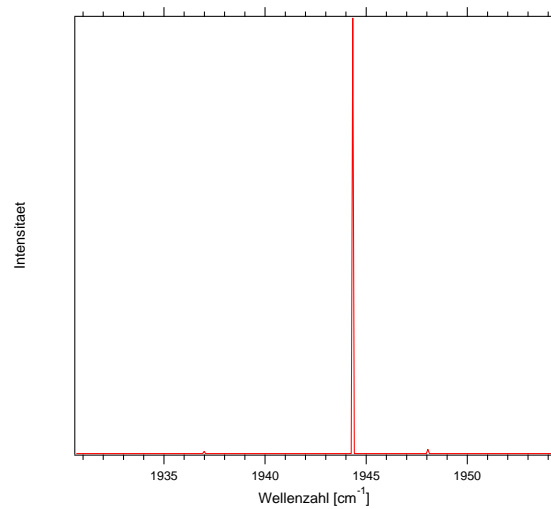


Abbildung 5.5: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1 K

Abbildung 5.6: CO 10 und 1 Kelvin

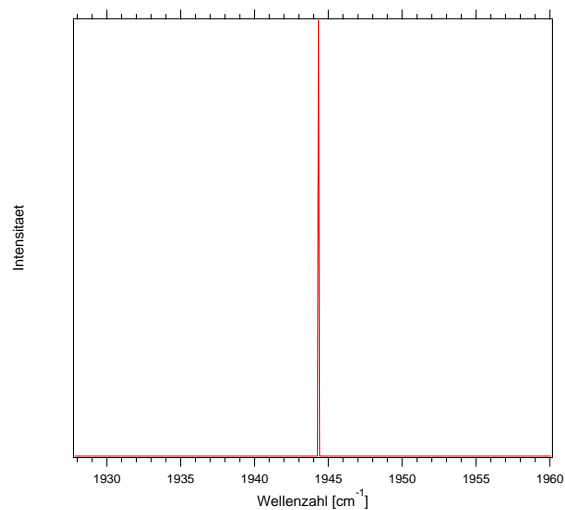


Abbildung 5.7: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 K

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)

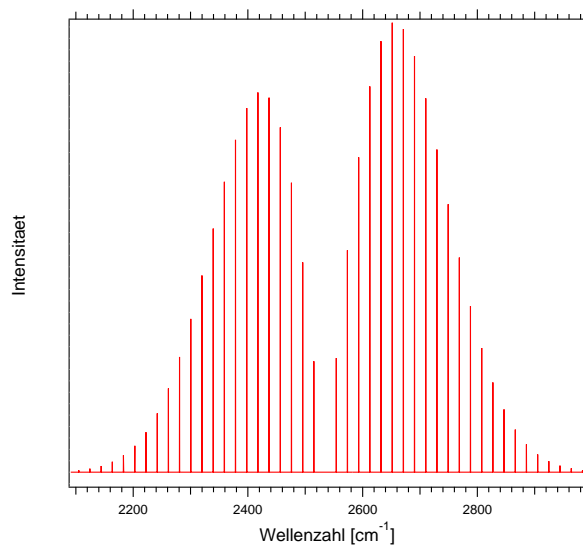


Abbildung 5.9: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1000 Kelvin

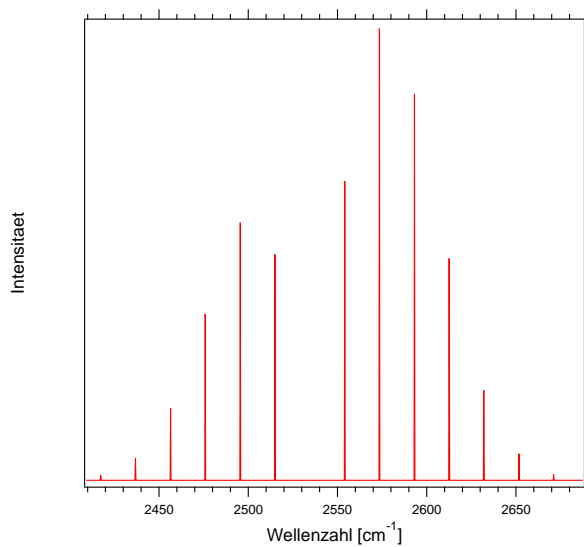


Abbildung 5.10: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 100 Kelvin

Abbildung 5.11: HCL 1000 und 100 Kelvin

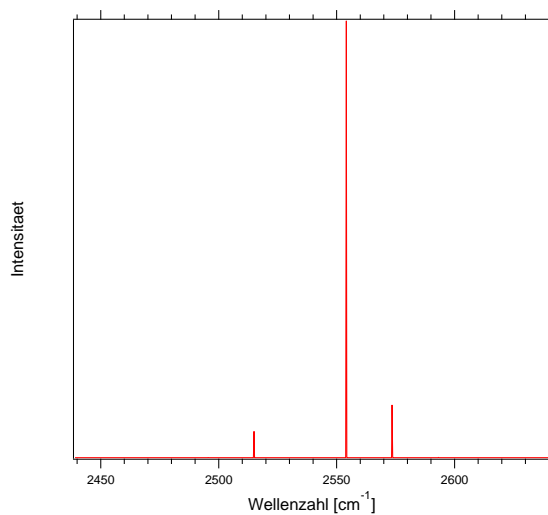


Abbildung 5.12: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 K

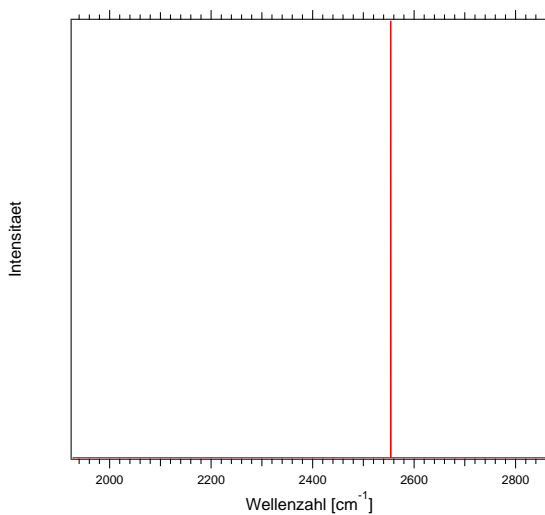


Abbildung 5.13: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1 K

Abbildung 5.14: HCL 10 und 1 Kelvin

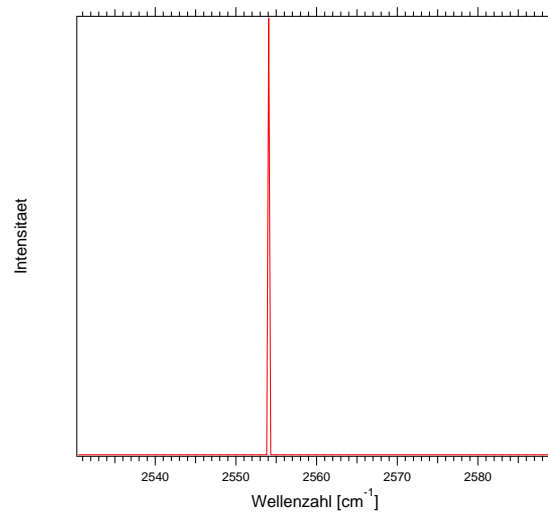


Abbildung 5.15: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 K

Abbildung 5.16: HCL 10 und 1 Kelvin

6 Rohdaten