

Institut für Experimentalphysik der Technischen Universität Graz

FORTGESCHRITTENEN PRAKTIKUM TECHNISCHE PHYSIK 1 & 2

PHY.M40 & PHY.M50

Übungstitel: Spektroskopie

Betreuer: Eber Alexander

Name: Wachmann Elias, Zach Andreas

Kennzahl: Gr. A2 Matrikelnummer: 12004232, 12004790

Datum: 08.11.2022 WS X SS

Inhaltsverzeichnis

1. Aufgabenstellung	3
2. Grundlagen und Voraussetzungen	3
2.1. Spektrographen	3
2.2. Extinktion	4
2.3. Photonenergie	4
2.4. Unsicherheitsanalyse	5
3. Versuchsanordnung	5
4. Geräteliste	7
5. Versuchsdurchführung und Messergebnisse	8
5.1. Prismenspektrograph	8
5.2. USB-Gitterspektrograph	10
6. Auswertung	10
6.1. Prismenspektrograph	10
6.2. Gitterspektrograph	13
6.3. Dissoziationsenergie	14
7. Diskussion	18
8. Zusammenfassung	20
A. Skripte zur Auswertung	22

1. Aufgabenstellung [1]

Im vorliegenden Laborversuch zur Spektroskopie werden drei verschiedene Spektren mit jeweils einem Prismenspektrographen und einem USB-Gitterspektrographen aufgenommen. Dabei werden die Emissionsspektren einer Hg- (Referenzspektrum) und einer Halogenlampe, sowie das Absorptionspektrum von Iod-Gas vor der Halogenlampe aufgezeichnet. Dazu werden folgende Punkte behandelt:

- Zusammenfassen der mittels Prismenspektrographen aufgenommenen Bilder zu einem Panorama-Spektrum
- Ermitteln der Dispersionsrelation mittels Referenzspektrum
- Ermitteln der Auflösung des Prismenspektrographen und des USB-Gitterspektrographen
- Ermitteln der Wellenlängen der Iod-Absorptionsbandkanten
- Ermitteln der Dissoziationsenergie des Iod-Moleküls im Grundzustand

2. Grundlagen und Voraussetzungen [1]

2.1. Spektrographen

Spektrographen werden verwendet, um Licht in sein Frequenzspektrum aufzuspalten, die Informationen aus diesem Spektrum können danach weiterverarbeitet werden. Als Dispersionselemente (aufspaltenden Elemente) fungieren Gitter oder Prismen. *Dispersion* beschreibt das physikalische Phänomen, dass optische Eigenschaften einer Welle von ihrer Frequenz abhängen.

Das zu untersuchende Licht muss durch den schmalen Eingangsspalt des Spektrographen scheinen. Ein Kollimatorrohr mit abschließender Linse sammelt das durch den Spalt fallende Licht und erzeugt ein paralleles Lichtbündel. Dieses parallele Lichtbündel durchscheint entweder ein oder mehrere Prismen, oder wird an einem oder mehreren Gittern gebrochen, was zu einer frequenzabhängigen Aufspaltung des Lichts führt. Nach dem Durchgang durch den dispersiven Teil des Spektrographen sind die Strahlen einer bestimmten Frequenz immer noch parallel, aber Strahlen verschiedener Frequenzen sind zueinander um einen bestimmten Winkel abgelenkt. Ein Objektiv fokussiert schließlich (im Idealfall) alle parallelen Strahlen der verschiedenen Frequenzen auf eine Ebene, auf der entweder der Bildschirm oder das Aufnahmegerät platziert werden kann. Jede Frequenz des einfallenden Lichts erzeugt (idealerweise) ein räumlich getrenntes Bild des Spalts (= Spektrallinien) in der zuvor erwähnten Brennebene.

In der Praxis kann der Eingangsspalt nicht unendlich klein gemacht werden, die Linsen haben eine endliche Größe und sind nicht frei von Abbildungsfehlern, die dazu führen, dass eine Linie, die von einer einzigen Frequenz stammt, mit einer nicht vernachlässigbaren Breite abgebildet wird. Nahegelegene Linien könnten dadurch überlappen. Des Weiteren

haben dispersive Elemente selbst ein begrenztes Auflösungsvermögen – das spektrale Auflösungsvermögen R – das als Qualitätskriterium eines Spektrographen fungiert.

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} \quad (1)$$

Dabei beschreibt λ eine bestimmte Wellenlänge und $\Delta\lambda$ die kleinstmögliche, noch unterscheidbare Wellenlängendifferenz (Rayleigh-Kriterium) zu dieser Wellenlänge. Je höher die spektrale Auflösung, desto besser das Gerät. Um die so ermittelten Spektrallinien analysieren zu können, müssen sie mit einem bekannten Referenzspektrum verglichen werden.

2.2. Extinktion

Beim Auftreffen von Lichtstrahlen an teiltransparenten Schichten kommt es zur Transmission (Licht geht durch die Schicht), Absorption (Licht gibt Energie an Materie ab) oder Streuung. Aus der einfallenden Intensität I_0 und der hinter der Schicht austretenden Intensität I_T lässt sich nach Gleichung 2 die Transmission T errechnen.

$$T = \frac{I_T}{I_0} \quad (2)$$

Ein weiterer häufig benutzter Maßstab ist die Extinktion E , welche wie in Gleichung 3 definiert ist.

$$E = -\log_{10}(T) = -\log_{10}\left(\frac{I_T}{I_0}\right) = \log_{10}\left(\frac{I_0}{I_T}\right) \quad (3)$$

2.3. Photonenergie

Die Energie eines Photons ist abhängig von seiner Frequenz f .

$$E = h \cdot f \quad (4)$$

Hierbei beschreibt h das Planck'sche Wirkungsquantum. Über den Zusammenhang

$$c = \lambda \cdot f \quad (5)$$

– wobei c die Wellengeschwindigkeit beschreibt – und die Einführung der *Wellenzahl* $\bar{\nu}$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} \quad (6)$$

lässt sich schließlich die Energie auch als

$$E = h \cdot c \cdot \bar{\nu} \quad (7)$$

ausdrücken.

2.4. Unsicherheitsanalyse

Die explizit angegebenen Unsicherheiten der ermittelten Messgrößen basieren auf Berechnungen durch die Unsicherheitsangabe nach den Datenblättern der verwendeten Messgeräte. Diese sind in Tabelle 4.1 vermerkt bzw. referenziert.

Die Fehlerfortpflanzung der berechneten Werte basiert auf der Größtunsicherheitsmethode nach Gauß. Um diese Berechnungen zeiteffizient durchführen zu können, wird für jeden Unterpunkt der Laborübung ein Skript in **Python** implementiert. Kernstück dessen ist das package **uncertainties** [2], das intern die Fehlerfortpflanzung berechnet. Gerundet wird nach den Angaben des Skriptums der Lehrveranstaltung *Einführung in die physikalischen Messmethoden* [3].

3. Versuchsanordnung

Nun soll auf den Versuchsaufbau und die Anordnung der Geräte genauer eingegangen werden. Sämtliche Geräte und Software, welche im Verlauf dieses Praktikums verwendet wurden, finden sich in Tabelle 4.1. Um ein möglichst gutes Bild zu erhalten, wird das Licht der beiden Lampen (Hg-Lampe bzw. Halogenlampe) mittels zweier Sammellinsen auf den Einfallsspalt des Prismenspektrographen gelenkt. Hierzu wird eine Linse (näher an der Lichtquelle) mit $f_1 = 120 \text{ mm}$ und eine mit $f_2 = 250 \text{ mm}$ verwendet. Die Linsen vor bzw. die Prismen im Spektrographen werden nun solange adjustiert, bis am Ausgangsarm ein scharfes Spektrum zu sehen ist. Hierzu verwendet man abwechselnd die Hg- bzw. die Halogenlampe und bildet das Spektrum auf einen Klebestreifen am Ausgang ab. Schließlich werden die Einstellungen so getroffen, dass man nur die Hg-Lampe aus dem Strahlengang nehmen muss, um auf die Halogenlampe zu wechseln, da die Halogenlampe von der Hg-Lampe verdeckt wird. Des Weiteren bleibt zwischen den Linsen auch noch Platz zum Einfügen der Iod-Zelle. In Abbildung 3.1 ist der Strahlengang vor dem Prismenspektrographen verdeutlicht, Abbildung 3.2 gibt einen Überblick über den gesamten Aufbau und Abbildung 3.3 gibt schließlich einen Überblick über den Aufbau zur Messung mittels Gitterspektrographen.



Abbildung 3.1: Aufbau des Strahlengangs vor dem Prismenspektrograph

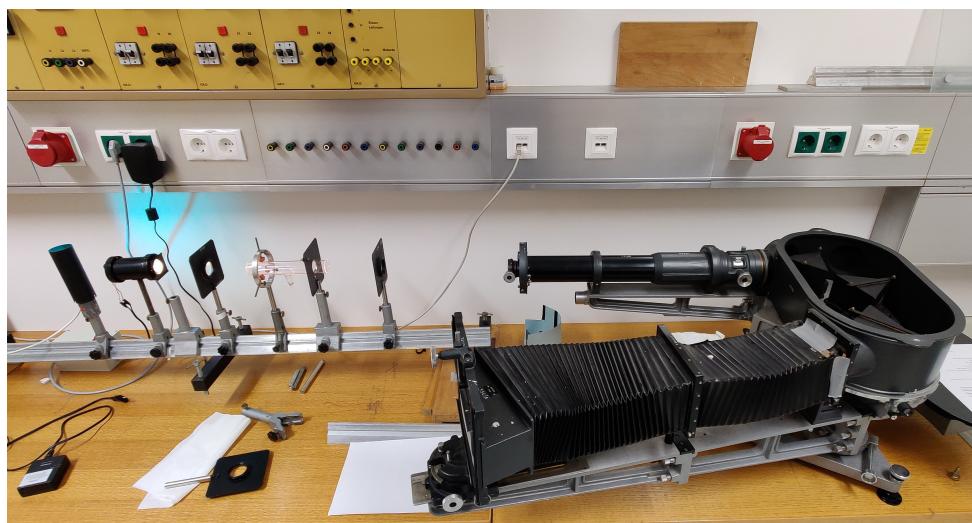


Abbildung 3.2: Überblick über den Aufbau des Prismenspektrographen

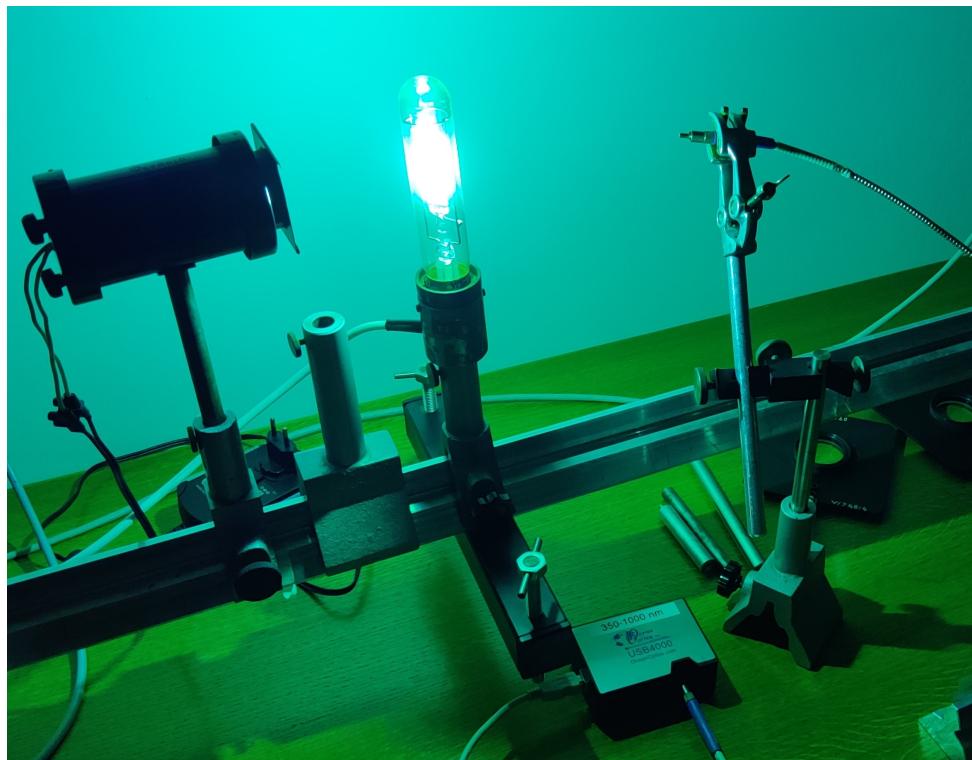


Abbildung 3.3: Überblick über den Aufbau des Gitterspektrographen

Die letztendlich gewählten Einstellungen des Prismenspektrographen sind in Unterabschnitt 5.1 angegeben.

4. Geräteliste

Für die Versuchsaufbauten und Auswertung wurden die in Tabelle 4.1 angegebenen Geräte und Programme verwendet.

Tabelle 4.1: Verwendete Geräte und Software sowie wichtige Materialien

Name	Hersteller	Modell-Nr.	Inventar-Nr.	Anmerkung
Prismen- spektrograph	Steinheil	16331	-	-
USB-Gitter- spektrograph	Oceanoptics	USB4000	-	Name mittlerweile Ocean Insight
Linse 1	-	-	-	$f_1 = 120 \text{ mm}$
Linse 2	-	-	-	$f_2 = 250 \text{ mm}$
Halogenlampe	Leybold	-	F4	-
Hg-Lampe	-	-	V/629/2	-
Iodzelle	-	-	-	-
Klebestreifen	-	-	-	-
Spiegelreflex- kamera	-	-	0206884	-
Kamera- halterung	-	15444	0153624	-
EOS Utility	-	-	-	-
SpectraSuite	-	-	-	-

5. Versuchsdurchführung und Messergebnisse

Die Versuchsdurchführung wird im Folgenden unterteilt, es wird zuerst die Versuchsdurchführung zum Prismenspektrographen und anschließend jene zum USB-Gitterspektrographen ausgeführt.

5.1. Prismenspektrograph

Der Prismenspektrograph hat am Ein- und Ausgangsarm diverse Einstellungsmöglichkeiten, welche der Abbildung eines scharfen Spektrums dienen. Zuerst wird mittels Hg-Lampe und geeignetem Aufbau zweier Sammellinsen (siehe Abbildung 3.1) das Licht auf den Eingangsspalt gebündelt. Anschließend werden die drei Prismen im Spektrographen so justiert, dass das aufgespaltene Licht am Ausgangsarm zu erkennen ist. Abgebildet wird das Spektrum dabei auf einen Klebestreifen, welcher über den Ausgangsspalt geklebt wird. Die Einstellungen am Prismenspektrographen sind in Tabelle 5.1 angeführt.

Tabelle 5.1: Einstellungen des verwendeten Prismenspektrographen

Name	Einstellung	Einheit	Anmerkung
Prisma Eingangsspalt	50 \pm 15	$^{\circ}$	Schätzwert außerhalb der Skala
Prisma Mittels	-0,5 \pm 0,5	$^{\circ}$	-
Prisma Ausgangsspalt	8,0 \pm 0,5	$^{\circ}$	-
Eingangsspaltöffnung	546 \pm 1	μm	-
Kollimatorrohrbrennweite	141,5 \pm 0,1	mm	-
Winkel Ausgangsarm	11,42 \pm 0,02	$^{\circ}$	-
Entfernung Ausgangsarm	45,2 \pm 0,1	mm	Skala auf Arm
Winkel Kamerahalterung	11,42 \pm 0,02	$^{\circ}$	-

Mittels dieser Einstellungen gelingt eine scharfe Abbildung des Spektrums auf die Bildebene, vor welcher schließlich der Kamerasensor platziert werden wird. Durch mehrmaliges Hin- und Herwechseln zwischen Hg- und Halogen-Lampe wird so schließlich ein gangbarer Mittelweg gefunden, bei welchem die Abbildungsfehler, welche durch die Linsen erzeugt werden, in beiden Fällen minimal sind.

Sobald der Aufbau richtig eingestellt ist, wird die Kamera vor dem Ausgangsarm platziert. Diese befindet sich in einer beweglichen Halterung, welche mittels Stellschraube präzise bewegt werden kann. Die Stellschraube weist jedoch ein nicht zu vernachlässigendes Spiel auf, weswegen sehr kleine Änderungen der Position nicht präzise durchgeführt werden können. Die Kamera wird mittels Kabel mit dem PC verbunden und über die Software *EOS Utility* angesteuert. Es wird das wellenlängenhohe Ende des Spektrums gesucht und der dargestellte rote Streifen des Spektrums der Quecksilberdampflampe mittels PC-Steuerung am äußersten Rand des Bildbereichs abgelichtet. Danach wird die Hg-Lampe durch die Halogenlampe ersetzt, das Spektrum wird abgebildet, anschließend erfolgt derselbe Vorgang mit zusätzlicher Iod-Zelle. Erst dann wird wieder auf die Hg-Lampe gewechselt und die Kameraposition mittels Stellschraube so verändert, dass sich der rote Streifen nun am anderen Ende des Bildbereichs befindet, aber immer noch ersichtlich ist. Dies ist für die nachfolgende Auswertung von höchster Relevanz. Im vorliegenden Fall waren 16 Umdrehungen der Stellschraube nötig, um die Kamera in die eben beschriebene Position zu bringen, diese Zahl wird von nun an für jede weitere Bewegung der Kamera konstant gehalten. Alle weiteren Abbildungen werden nach demselben Schema erstellt: Kamera um 16 Umdrehungen bewegen, Foto Hg, Foto Halogen, Foto Halogen mit Iod. Danach erst wird die Kamera wieder bewegt. So ist gewährleistet, dass für jede Abbildung des Absorptionspektrums Referenzbilder vorhanden sind. Insgesamt erfolgen neun derartige Durchgänge, was 27 einzelne Bilder liefert.

5.2. USB-Gitterspektrograph

Im zweiten Teilversuch werden dieselben Frequenzspektren – Hg-Lampe, Halogenlampe und Halogenlampe mit absorbierender Iod-Zelle – noch einmal bestimmt, diesmal jedoch mit einer weitaus simpleren Apparatur: einem USB-Gitterspektrographen. Dieser besitzt eine optische Leitung, an deren Ende sich ein Messfühler befindet. Dieser ist äußerst sensiv, weshalb er nicht direkt in den Lichtkegel der eben beschriebenen Lichtquellen zu halten ist, sondern unter einem steileren Winkel etwas abseits, was die Intensität des einfallenden Lichts verringert.

Der Gitterspektrograph wird mit dem vor Ort zur Verfügung stehenden PC verbunden und über die Software *SpectraSuite* des Herstellers *Oceanoptics* angesteuert. Die Position des Sensors wird so gewählt, dass das Maximum des Spektrums nicht sättigt und somit vom Spektrographen trotzdem korrekt ausgemessen wird. Zu jeder der drei Lampenkonfigurationen wird von der Software die Intensität (in arbiträren Einheiten) zur korrespondierenden Wellenlänge (in Nanometer) aufgenommen, diese werden zur weiteren Verarbeitung in tabellenartigem Format in einer Textdatei gespeichert.

6. Auswertung

6.1. Prismenspektrograph

Zur Auswertung werden nun die Einzelaufnahmen der jeweiligen Spektren kombiniert und zu einem Panoramabild zusammengefügt. Da es zwischen den Einzelaufnahmen einen gewissen Überlapp gibt, wird mittels **GIMP** der Pixelabstand zwischen zwei gleichen Maxima in unterschiedlichen Bildern ermittelt. Dieser Versatz Δp_{shift} ergibt sich zu:

$$\Delta p_{\text{shift}} = 3625 \text{ px}$$

Nun werden die Bilder der Reihe nach zusammengefügt und es ergeben sich die nachfolgenden Emissionsspektren. Unter den Spektren werden immer Gray-Scale-Intensitäten zu den jeweiligen Bildern angegeben. Diese errechnen sich aus der Summe der Rot-, Grün- und Blaukanäle.

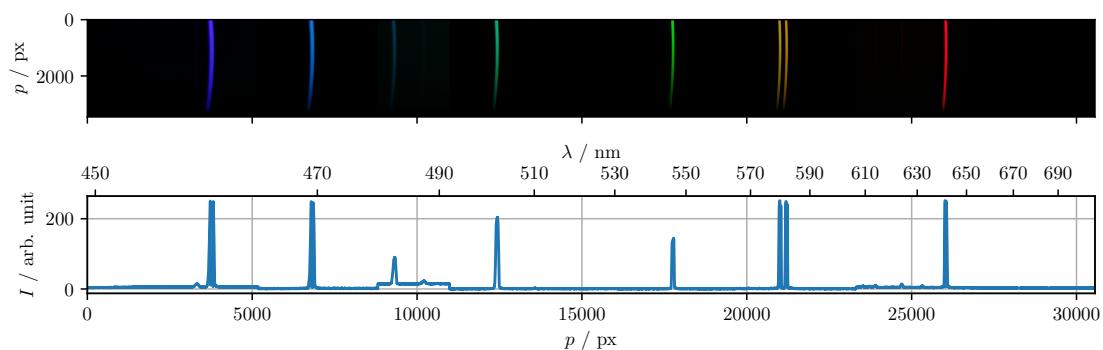


Abbildung 6.1: Emissionsspektrum einer Hg-Lampe und korrespondierende Intensitätsverteilung

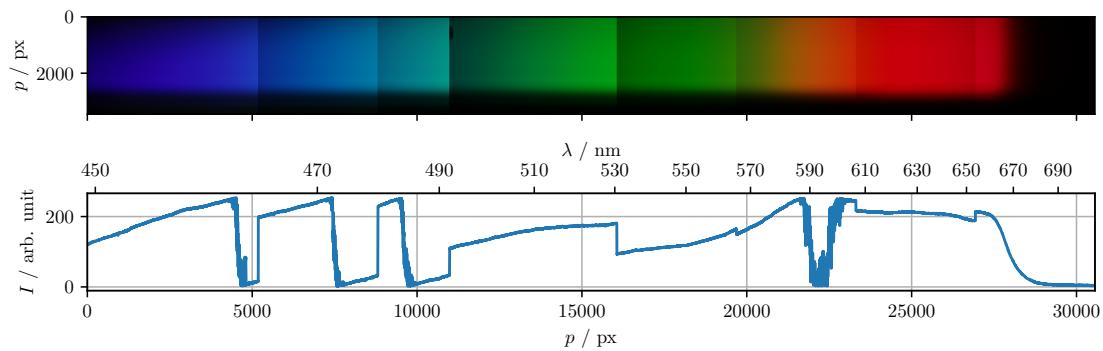


Abbildung 6.2: Emissionsspektrum einer Halogen-Lampe und korrespondierende Intensitätsverteilung

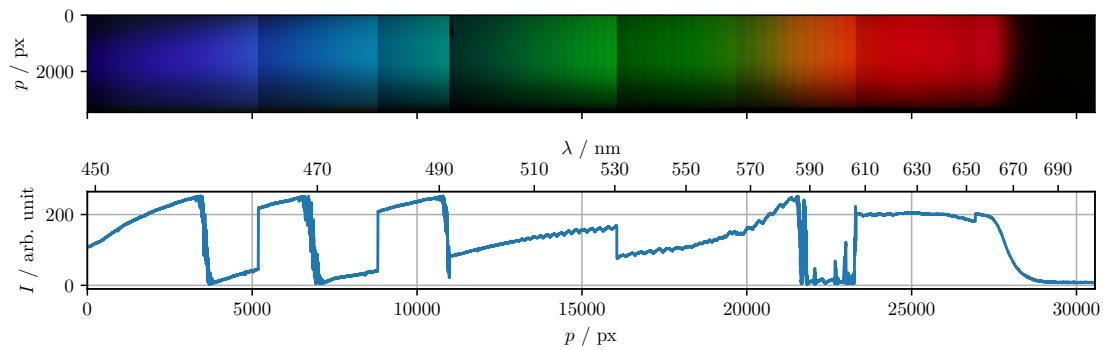


Abbildung 6.3: Absorptionsspektrum einer Iod-Zelle vor einer Halogen-Lampe und korrespondierende Intensitätsverteilung

Um nun auch auf die Wellenlängen schließen zu können, die nicht im diskreten Emissi-

onsspektrum der Hg-Lampe vorkommen, werden die Werte zwischen den Referenzwerten mittels Regression, wie in Abbildung 6.4 ersichtlich, auf ein quadratisches Polynom gefit-
ted.

$$\lambda(p) = a \cdot p^2 + b \cdot p + c$$

Mithilfe dieser Formel kann man nun die korrespondierende Wellenlänge für einen gege-
benen Pixel errechnen. Die Koeffizienten ergeben sich aus dem Fit zu:

$$a = (2,3 \pm 0,5) \cdot 10^{-7} \text{ nm px}^{-2}$$

$$b = (0,0013 \pm 0,0016) \text{ nm px}^{-1}$$

$$c = (450 \pm 12) \text{ nm}$$

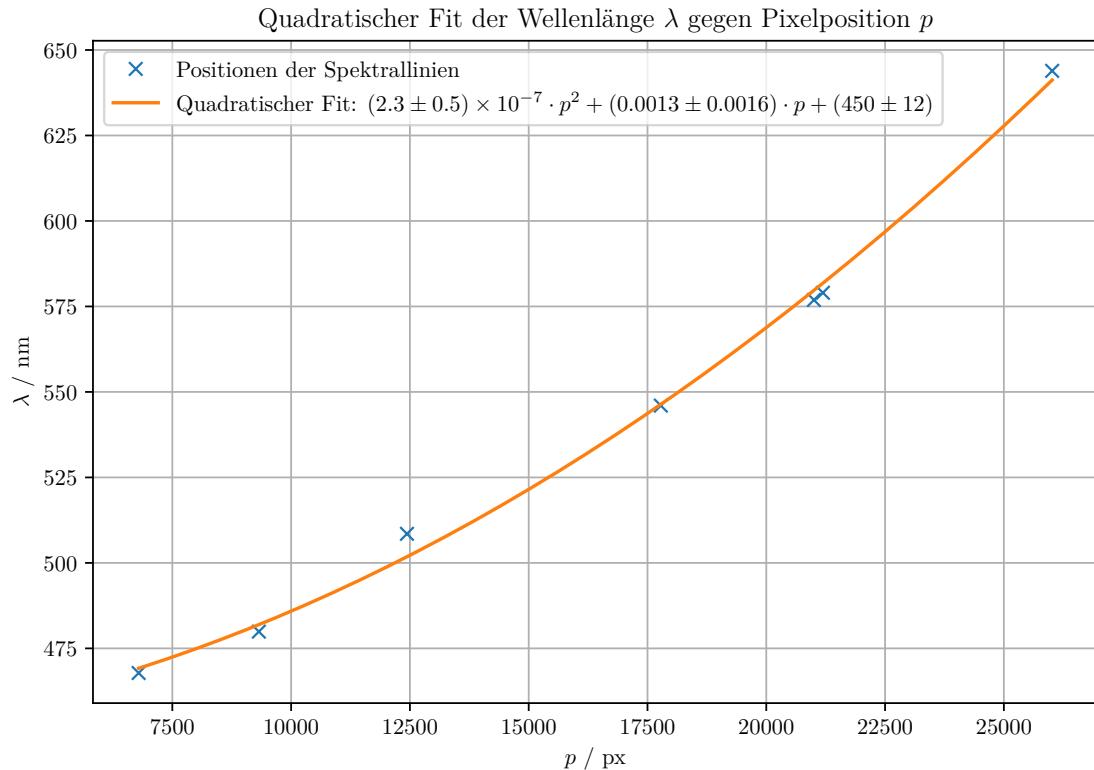


Abbildung 6.4: Quadratischer Fit – Wellenlänge als Funktion der Pixelzahl

Die Referenzwerte zu den Hg-Emissionslinien nach [1] sind in Tabelle 6.1 ersichtlich.

Tabelle 6.1: Wellenlängen der Emissionslinien der Hg-Lampe in nm (exakt laut Definition) und korrespondierende Pixelpositionen p in px mit Unsicherheit $\Delta p = 30$ px (gemessen an violetter Linie).

λ / nm	p / px	Farbe
Nicht in Referenzgrafik [1] vorhanden	3729	Violett
467,8	6791	Blau
479,9	9321	Cyan
508,5	12 438	Türkis
546,0	17 781	Grün
576,9	21 003	Gelb ₁
579,0	21 192	Gelb ₂
643,9	26 017	Rot

Aufgrund der in Abschnitt 7 verschriftlichten Argumentation ergibt sich die Unsicherheit in p – der kleinstmögliche auflösbare Unterschied zwischen zwei Spektrallinien – in px zu

$$\Delta p = 30 \text{ px}$$

woraus für die Unsicherheit in der Wellenlänge λ des Prismenspektrographen in nm

$$\Delta\lambda_P \approx 0,4 \text{ nm}$$

folgt. Hier sei noch einmal angemerkt, dass sich $\Delta\lambda$ mit λ ändert und die einzelnen Emissionslinien nicht alle gleich gut fokussiert sind. Da besonderes Augenmerk auf die Schärfe der gelben Doppellinie gelegt wurde, ist hier auch die Auflösung circa doppelt so gut.

Mit diesem Wert und Gleichung 1 kann das spektrale Auflösungsvermögen des Prismenspektrographen berechnet werden. Fairerweise kann dieses nur für die am schlechtesten aufgelöste Wellenlänge angegeben werden (die mit der niedrigsten Wellenlänge). Nachdem die vorhandene Spektrallinie mit der geringsten Wellenlänge – die violette – sich jedoch *nicht* in der Referenztabelle aus [1] befindet, wird diese anhand der gefitteten Kurve berechnet.

$$\lambda_{\text{violett}} = 458 \text{ nm}$$

Für diese Wellenlänge errechnet sich das spektrale Auflösungsvermögen des Prismenspektrographen zu

$$R_P \approx 1144$$

6.2. Gitterspektrograph

Im Vergleich zum Prismenspektrographen wird für die Unsicherheitsabschätzung des Gitterspektrographen die Differenz zwischen zwei sehr nahegelegenen Wellenlängen herangezogen, die als zwei unabhängige lokale Maxima dargestellt werden können. Dafür werden

die lokalen Maxima bei den Wellenlängen 458,07 nm und 458,70 nm herangezogen. Damit ergibt sich die Unsicherheit zu

$$\Delta\lambda_G \approx 0,63 \text{ nm}$$

und das spektrale Auflösungsvermögen des Gitterspektrographen zu

$$R_G \approx 727$$

6.3. Dissoziationsenergie

Aufgrund der besseren Auflösung werden zur Auswertung der Dissoziationsenergie schließlich die Daten des Prismenspektrographen herangezogen.

Sieht man sich die Intensitätsverläufe der unterschiedlichen Lampen (mit ggf. Iod im Strahlengang) in Abbildung 6.5 näher an, so sind zwar die eindeutigen Emissionslinien der Hg-Lampe gut erkennbar, die Extinktionsmaxima im Iod aber kaum.

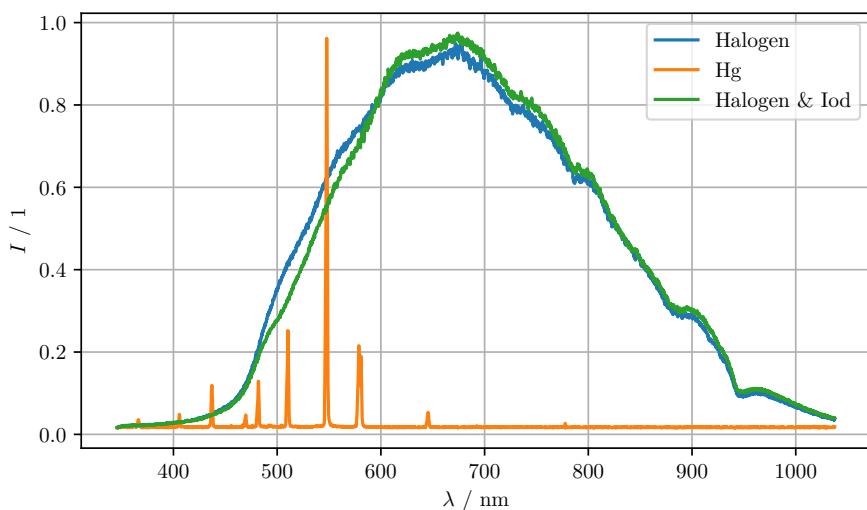


Abbildung 6.5: Vergleich der Intensitätsverläufe normiert auf den jeweiligen Maximalwert

In den folgenden beiden Abbildungen 6.6 und 6.7 wird nochmals der Unterschied zwischen dem Prismenspektrographen und dem Gitterspektrographen verdeutlicht.

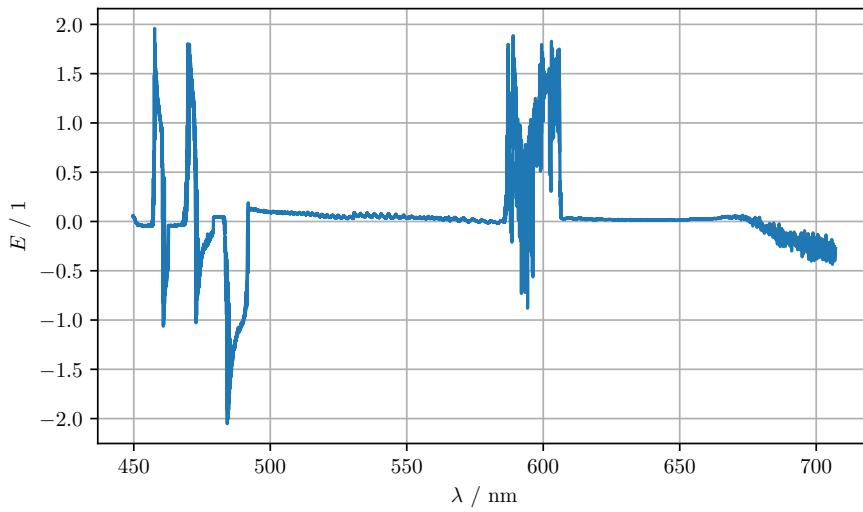


Abbildung 6.6: Extinktionsspektrum $E = -\log_{10}(I_{\text{Iod}}/I_{\text{Halogen}})$ der Iodzelle mittels Prismenspektrograph

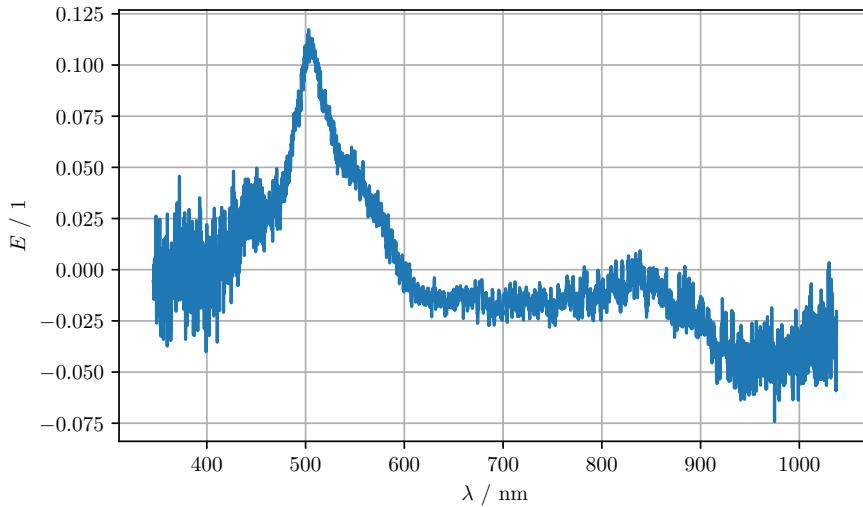


Abbildung 6.7: Extinktionsspektrum $E = -\log_{10}(I_{\text{Iod}}/I_{\text{Halogen}})$ der Iodzelle mittels Gitterspektrograph

Vergleicht man weiter exemplarisch Ausschnitte zur Ermittlung der Bandgrenzen, sieht man die Überlegenheit des Prismenspektrographen im Vergleich zum Gitterspektrographen noch deutlicher. So sieht man in Abbildung 6.8 die lokalen Maxima der Extinktion wesentlich besser als in Abbildung 6.9. In letzterer Abbildung wird ebenfalls deutlich, dass es unmöglich ist, mit der geringeren Auflösung des Gitterspektrographen eindeutige lokale Maxima zu finden.

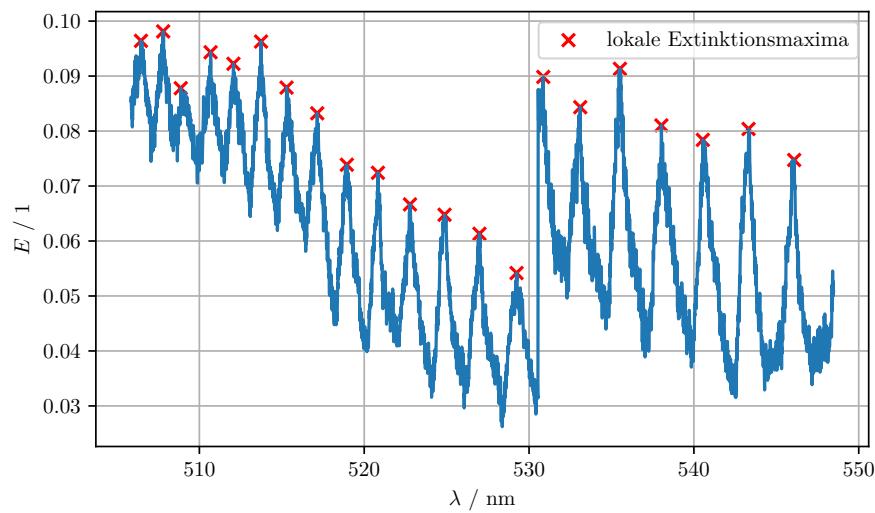


Abbildung 6.8: Extinktion $E = -\log_{10}(I_{\text{Iod}}/I_{\text{Halogen}})$ mittels Prismenspektrographen und Peaks an den Bandgrenzen.

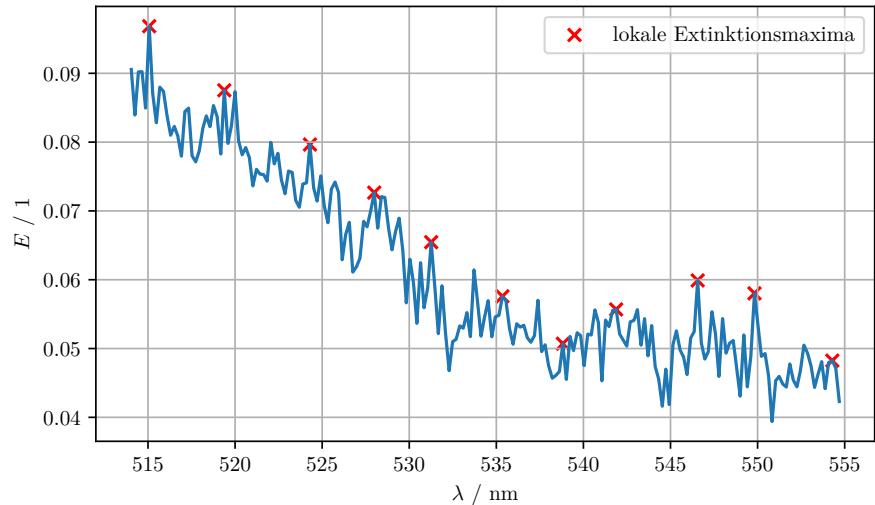


Abbildung 6.9: Extinktion $E = -\log_{10}(I_{\text{Iod}}/I_{\text{Halogen}})$ mittels Gitterspektrographen und Peaks an den Bandgrenzen.

Trägt man nun die mittels Gleichung 6 aus den Wellenlängen errechneten Wellenzahlen gegen einen arbiträren Index auf und legt einen quadratischen Fit durch die Daten, erhält man den in Abbildung 6.10 dargestellten Zusammenhang.

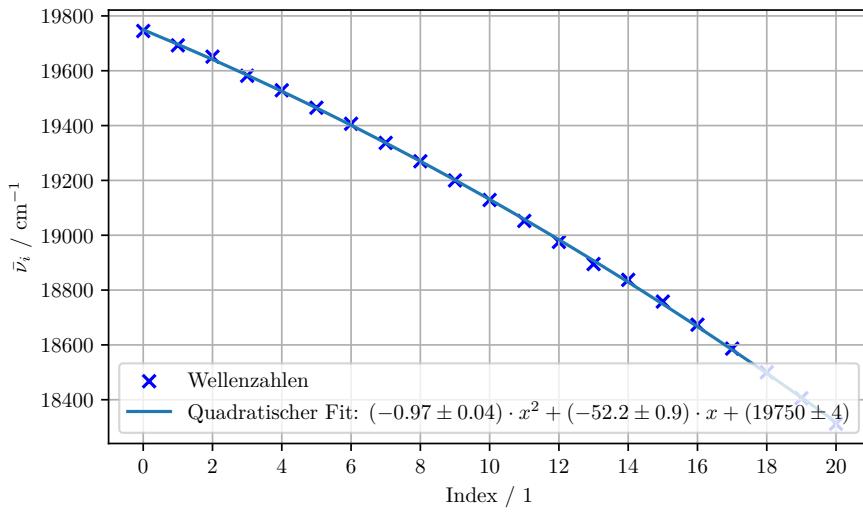


Abbildung 6.10: Wellenzahl der ermittelten Bandgrenzen aus den lokalen Maxima der Abbildung 6.8 und quadratischer Fit der Daten

Somit erhält man mittels quadratischen Fits den folgenden Zusammenhang für die Wellenzahlabhängigkeit der Bandgrenzen:

$$\bar{\nu} \cdot \text{cm}^{-1} = (-0.97 \pm 0.04) \cdot \text{Index}^2 - (52.2 \pm 0.9) \cdot \text{Index} + (19750 \pm 4)$$

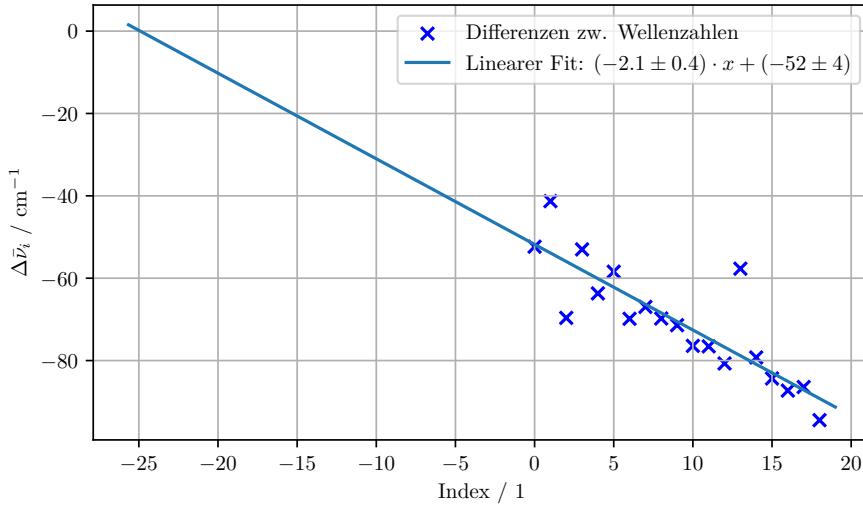


Abbildung 6.11: Differenzen zweier aufeinanderfolgender Wellenzahlen aus Abbildung 6.8 und linearer Fit der Daten

Analog ergibt sich für den Fit der Wellenzahldifferenzen folgender Zusammenhang:

$$\Delta \bar{\nu} \cdot \text{cm}^{-1} = (-2.1 \pm 0.4) \cdot \text{Index} - (52 \pm 4)$$

Zur Ermittlung der Dissoziationsenergie wird nun der Schnittpunkt Index_{SP} des linearen Fits aus Abbildung 6.11 ermittelt. Dieser ergibt sich aufgrund der hohen Unsicherheit der Daten, die dem linearen Fit zugrunde liegen, zu:

$$\text{Index}_{\text{SP}} = -25 \pm 11$$

Am Index_{SP} ergibt sich so aus dem quadratischen Fit ein Wert für die Wellenzahl von

$$\bar{\nu}_{\text{Index}_{\text{SP}}} = 20\,450 \pm 80$$

Hier ist die Unsicherheit bedingt durch den wesentlich besseren Fit kleiner. Aus Gleichung 7 lässt sich nun die Scheitelenergie mittels $\bar{\nu}_{\text{Index}_{\text{SP}}}$ errechnen, diese ergibt sich zu:

$$E_{\text{Scheitel}} = (4,062 \pm 0,016) \cdot 10^{-19} \text{ J} = (2,535 \pm 0,010) \text{ eV}$$

Zieht man schlussendlich noch die Anregungsenergie $E_{\text{Anregung}} = (0,970 \pm 0,005) \text{ eV}$ von der Scheitelenergie ab, so erhält man die Dissoziationsenergie von I₂. Diese ergibt sich somit zu:

$$E_{\text{Dis}} = (1,565 \pm 0,011) \text{ eV}$$

7. Diskussion

Die Unsicherheitsanalyse sowohl für den Prismen- als auch für den Gitterspektrographen entpuppt sich als äußerst schwierig.

Beim Prismenspektrographen erscheinen aufgrund von Abbildungsfehlern (z.B.: chromatische Aberration) die dargestellten Spektrallinien auf der Bildebene leicht gebogen. Den Dispersionseffekten ist geschuldet, dass diese Biegung im blauen Spektralbereich stärker ausfällt als im roten. Da das Hg-Spektrum eine markante gelbliche Doppellinie aufweist, wurde die Ebene auch derart ausgerichtet, dass diese Doppellinie scharf abgebildet wird. Da die Linie mit niedrigster Wellenlänge – die violette – nun per Konstruktion unschärfer (ausgefranster) und stärker gebogen abgebildet wird, kann das spektrale Auflösungsvermögen auch nur in Bezug auf diese Linie berechnet werden, da hier die größte Unsicherheit liegt. Diese besagte violette Linie, die im optischen Spektrum äußerst markant auftritt, wird in der Referenztabelle [1] jedoch gar nicht erwähnt. Für den quadratischen Fit – Wellenlänge gegen Pixelposition – wurde diese Linie somit nicht verwendet. Mithilfe der errechneten Fitparameter wird somit die Wellenlänge der violetten Linie aufgrund ihrer Pixelposition errechnet und der Wert ergibt sich zu $\lambda_{\text{violett}} = 458 \text{ nm}$. Da diese Linie nicht für den Fit verwendet wurde, ist die Berechnung der Wellenlänge mittels Fitparamter kein Zirkelschluss und somit zulässig.

Um die Breite der violetten Spektrallinie ermitteln zu können, wurde die Mitte derselben abgeschätzt und die Pixelposition am obersten Rand dieser Linie mit der Position der Mitte der weitesten Auslenkung der gekrümmten Kurve verglichen. Diese Differenz beschreibt den Bereich, auf den die violette Linie abgebildet wird und in welchem eine zweite, sehr nahegelegene Linie unbemerkt bliebe, da das Resultat für eine breitere Linie

gehalten würde. Diese Breite kann auch nur abgeschätzt werden, da die Linie aufgrund der Abbildungsfehler nicht scharf begrenzt ist, sondern ein Intensitätsabfall am Rand abgebildet wird. Deshalb liegt es im Ermessen der Auswertenden, wo der Rand der Linie festgesetzt wird. Auch den Punkt der weitesten Auslenkung der gebogenen Linie kann man nur nach bestem Wissen und Gewissen abschätzen. Diese beiden Faktoren – Berechnung statt Referenzierung der Wellenlänge der violetten Spektrallinie und Abschätzung der Breite derselben – führen zu einer nicht vernachlässigbaren Unsicherheit im spektralen Auflösungsvermögen, die jedoch nicht beziffert werden kann.

Für den Gitterspektrographen wurden aus den gespeicherten Werten in der Textdatei zwei Wellenlängen in der Nähe des für den Prismenspektrographen verwendeten Wertes $\lambda_{\text{violett}} = 458 \text{ nm}$ entnommen: 458,07 nm und 458,70 nm. Diese beiden Werte wurden gewählt, da sie im Vergleich zu den benachbarten Wellenlängen lokale Maxima in der Intensität aufweisen und somit mit freiem Auge klar unterschieden werden können.

Vergleicht man nun die beiden berechneten spektralen Auflösungsvermögen, so ist der Wert des Prismenspektrographen ($R_P \approx 1144$) deutlich höher als jener des Gitterspektrographen ($R_G \approx 727$). Dieser Unterschied wird auch bei der qualitativen Betrachtung der Abbildungen 6.8 und 6.9 ersichtlich. Das Extinktionsspektrum des Prismenspektrographen (Abbildung 6.8) weist grundsätzlich mehr Rauschen auf, die lokalen Maxima der Kurve sind aber deutlich klarer ersichtlich. Im Vergleich dazu sind die Maxima des Extinktionsspektrums des Gitterspektrographen (Abbildung 6.9) bereits mit freiem Auge schwer zu erkennen, was das Finden der Maxima für den Computer nur noch schwieriger macht. Die Diskretisierung des USB-Gitterspektrographen bei der Aufnahme des Intensitätsspektrums führt zu einer viel zackigeren, schwerer interpretierbaren Kurve. Obgleich die Auflösung des USB-Gitterspektrographen theoretisch höher sein könnte, da er in kleinen Abständen diskretisiert, birgt dies in der Praxis keinen Vorteil, da für zwei diskret aufgenommene benachbarte Maxima nicht geklärt werden kann, ob es sich hierbei um ein breites Maximum oder zwei unterscheidbare schmale handelt.

Die nach dem in Unterabschnitt 6.3 beschriebenen Verfahren experimentell ermittelte Dissoziationsenergie von I_2 ergibt einen Wert von

$$E_{\text{Dis,exp}} = (1,565 \pm 0,011) \text{ eV}$$

Obgleich sich für die Position des Scheitels eine relativ hohe Unsicherheit ergibt ($\text{Index}_{\text{SP}} = -25 \pm 11$), folgt daraus nicht automatisch, dass dies auch für die Dissoziationsenergie gilt. Die Parabel, auf der die Energie liegt, verläuft sehr flach, weswegen eine vergleichsweise große Änderung in der unabhängigen Variable nur eine kleine Änderung in der abhängigen – der Energie – hervorruft.

Vergleicht man den Wert der experimentell ermittelten Dissoziationsenergie mit dem Literaturwert [4] der Dissoziationsenergie pro Bindung von I_2 von

$$E_{\text{Dis,lit}} = 1,57 \text{ eV}$$

so wird ersichtlich, dass der experimentell ermittelte Wert mit dem Literaturwert übereinstimmt, womit gezeigt wurde, dass im vorliegenden Laborversuch genau und gewissenhaft gearbeitet wurde.

8. Zusammenfassung

Im vorliegenden Praktikumsversuch wurde nach Aufbau und Einrichten der Spektrographen jeweils eine Aufnahme des Spektrums einer Halogen- und Hg-Lampe, sowie eines einer Halogenlampe mit Iod-Gas im Strahlengang aufgenommen. Die aufgenommenen Einzelbilder wurden computergestützt zu einem Spektrum zusammengefügt (siehe Abbildungen 6.1 bis 6.3).

Aus dem Hg-Spektrum konnte mittels tabellierter Emissionslinien die Relation zwischen Pixel und Wellenlänge durch einen quadratischen Fit (siehe Abbildung 6.4) ermittelt werden. Daraus lässt sich das Auflösungsvermögen des Prismenspektrographen mit $R_P = 1144$ und das des Gitterspektrographen mit $R_G = 727$ beziffern.

Abschließend wurde die Dissoziationsenergie von I_2 mit $E_{\text{Dis,exp}} = (1,565 \pm 0,011) \text{ eV}$ berechnet, welche in guter Übereinstimmung mit dem Literaturwert von $E_{\text{Dis,lit}} = 1,57 \text{ eV}$ übereinstimmt.

Literaturverzeichnis

- [1] Institut für Experimentalphysik. „Spectrograph“. In: (2016). URL: https://tc.tugraz.at/main/pluginfile.php/299201/mod_folder/content/0/Spectrograph_neu.pdf?forcedownload=1.
- [2] E. Lebigot. uncertainties. 2022. URL: <https://github.com/lebigot/uncertainties/>.
- [3] R. Dämon u. a. „Einführung in die physikalischen Messmethoden“. In: Bd. 7. 2021.
- [4] Bond-dissociation energy. In: Page Version ID: 1107035915. Aug. 2022. URL: https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Bond-dissociation_energy&oldid=1107035915 (besucht am 18.11.2022).

Abbildungsverzeichnis

3.1. Aufbau des Strahlengangs vor dem Prismenspektrograph	6
3.2. Überblick über den Aufbau des Prismenspektrographen	6
3.3. Überblick über den Aufbau des Gitterspektrographen	7
6.1. Hg-Spektrum	11
6.2. Halogen-Spektrum	11
6.3. Iod-Spektrum	11
6.4. Quadratischer Fit – Wellenlängenformel	12
6.5. Vergleich Intensitätsverläufe	14
6.6. Extinktion mit Prismenspektrograph	15
6.7. Extinktion mit Gitterspektrograph	15
6.8. Extinktion mit Prismenspektrograph	16
6.9. Extinktion mit Gitterspektrograph	16
6.10. Wellenzahl der Bandgrenzen	17
6.11. Wellenzahldifferenzen der Bandgrenzen	17

Tabellenverzeichnis

4.1. Geräteliste	8
5.1. Geräteliste	9
6.1. Emissionslinien und Pixelpositionen Hg-Lampe	13

A. Skripte zur Auswertung

Zur Auswertung der einzelnen Teipunkte des Laborversuchs wurden neben der Bildbearbeitungssoftware **GIMP** auch folgende **Python**-Skripte verwendet:

crop.py zum Erstellen der Panorama-Spektren:

```
1 import matplotlib.pyplot as plt
2 from PIL import Image
3 import numpy as np
4 import pickle as pic
5 from skimage.measure import profile_line
6 import labtool as lt
7
8 # reference pictures Hg_01 and Hg_02: 5184 x 3456
9 # pixel position at the right end of the red line with closest HEX code
# possible
10 width = 5184
11 height = 3456
12 end_01 = 4577 # at HEX 320001
13 start_02 = 952 # at HEX 350000
14 shift = end_01 - start_02
15 panowidth = width + 7 * shift
16 DATAPATH = "02_Spektroskopie/python/data"
17
18
19 def wavelength(pixels: np.ndarray) → np.ndarray:
20     with open("./02_Spektroskopie/python/data/wavelength_fit_pickle", "rb") as file:
21         parameters = pic.load(file)
22
23     def quadratic_function(a, b, c):
24         return lambda x: a * x**2 + b * x + c
25
26     return quadratic_function(*parameters)(pixels)
27
28
29 def getIntensity(greyscale_img, profile_line_height) → np.ndarray:
30     intensity = profile_line(
31         greyscale_img, src=(profile_line_height, 0), dst=(profile_line_height,
32         panowidth), linewidth=50
33     )
34     return intensity
35
36 def getRGBSum(img):
37     return img[:, :, 0] + img[:, :, 1] + img[:, :, 2]
38
39
40 def run() → None:
41     HG_BASE_NAME = "Hg_"
42     HALO_BASE_NAME = "Halo_"
43     IOD_BASE_NAME = "I_"
```

```
44     scanline_heights = [height // 2] * 3
45
46     for running_count, name in enumerate([HG_BASE_NAME, HALO_BASE_NAME,
47     IOD_BASE_NAME]):
48
49         for i, picture_name in enumerate([f"{name}0{i}.JPG" for i in range(1,
50         9)]):
51             if i == 5:
52                 img = Image.open(f"02_Spektroskopie/data/Bilder_gut/{
53                 picture_name}")
54                 panorama.paste(img.crop((1450, 0, width, height)), (i * shift +
55                 1450, 0))
56             else:
57                 panorama.paste(Image.open(f"02_Spektroskopie/data/Bilder_gut/{
58                 picture_name}"), (i * shift, 0))
59
60             # Left-right flip image and save it
61             panorama = np.asarray(panorama.transpose(Image.FLIP_LEFT_RIGHT))
62             intensity = getIntensity(getRGBSum(panorama), scanline_heights[
63             running_count])
64
65             # pickle intensities
66             with open(f"./02_Spektroskopie/python/data/{name}pickle", "wb") as file
67             :
68                 pic.dump(intensity, file)
69
70             # plot the whole thing
71             cm = 1 / 2.54
72             fig, ax = plt.subplots(nrows=2, sharex=True, figsize=(21 * cm, 7 * cm))
73             extra_ax = ax[1].twiny()
74             lambda_loc = [x for x in range(450, 691, 20)]
75             pixel_loc = []
76             c = 0
77             for l in lambda_loc:
78                 for p in range(c, len(intensity)):
79                     if int(wavelength(p)) == l: # type: ignore
80                         c = p
81                         pixel_loc.append(p)
82                         break
83
84             def lambda_ticks(x):
85                 new_ticks = wavelength(x)
86                 return [f"{int(tick)}" for tick in new_ticks]
87
88             ax[0].imshow(panorama, aspect="auto")
89             ax[0].set_ylabel("$p$ / px")
90             ax[0].set_xlim(0, len(intensity))
91
92             ax[1].plot(intensity)
93             ax[1].set_xlabel("$p$ / px")
94             ax[1].set_ylabel("$I$ / arb. unit")
```

```
90         extra_ax.set_xlim(ax[1].get_xlim())
91         extra_ax.set_xticks(pixel_loc)
92         extra_ax.set_xticklabels(lambda_ticks(np.array(pixel_loc)))
93         extra_lbl = r"\$\\lambda\$ / nm"
94         extra_ax.set_xlabel(extra_lbl)
95         ax[1].grid()
96
97     fig.savefig(f"02_Spektrioskopie/python/plots/{name}plot.pdf", dpi=500)
98
99     print(f"{name[:-1]} done")
100
101
102 def main() → None:
103     lt.pyplot()
104     run()
105
106
107 if __name__ == "__main__":
108     main()
```

wavelengths.py zum Erstellen des quadratischen Fits (Pixel-Wellenlänge-Zusammenhang):

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import pickle
4 from scipy.signal import find_peaks
5 import labtool as lt
6
7 SPECTRAL_LINES = list(reversed([643.9, 579, 576.9, 546, 508.5, 479.9, 467.8]))
8     # nm
9
10
11 def get_intensity_peaks() → np.ndarray:
12     with open("./02_Spektrioskopie/python/data/Hg_pickle", "rb") as file:
13         intensity = pickle.load(file)
14
15     distance = 100 # between two the two orange lines
16     height = 80 # height of lowest peak (light-blue-cyan-ish)
17     peaks, *_ = find_peaks(intensity, distance=distance, height=height)
18
19     return peaks
20
21
22 def fit_wavelengths_over_px() → None:
23     violet, *positions = get_intensity_peaks()
24
25     # quadratic fit
26     quadratic = lt.CurveFit(lambda x, a, b, c: a * x**2 + b * x + c, positions,
27                             SPECTRAL_LINES)
28     uarr_quadratic = lt.unp.uarray(quadratic.p, quadratic.u)
29     print(f"Fit parameters: {uarr_quadratic}")
30
31     fig, ax = plt.subplots(figsize=(7, 5))
32     linspace = np.linspace(positions[0], positions[-1], 2000)
```

```

31
32     label = "Quadratischer Fit: ${0:L} \cdot p^2 + ({1:L}) \cdot p + ({2:L})$"
33     ".format(*uarr_quadratic) # type: ignore
34
35     ax.plot(positions, SPECTRAL_LINES, "x", label="Positionen der
36     Spektrallinien")
37     ax.plot(linspace, quadratic(linspace), label=label)
38     ax.set_title(r"Quadratischer Fit der Wellenl nge $\lambda$ gegen
39     Pixelposition $p$")
40     ax.set_xlabel("$p / px$")
41     ax.set_ylabel(r"$\lambda / nm$")
42     ax.legend()
43     ax.grid()
44
45     fig.savefig("./02_Spektroskopie/python/plots/wavelength.png", dpi=500)
46     fig.savefig("./02_Spektroskopie/python/plots/wavelength.pdf")
47
48     with open("./02_Spektroskopie/python/data/wavelength_fit_pickle", "wb") as
49     file:
50         pickle.dump(quadratic.p, file)
51
52     def wavelength(pixels: np.ndarray) → np.ndarray:
53         def quadratic_function(a, b, c):
54             return lambda x: a * x**2 + b * x + c
55
56         return quadratic_function(*quadratic.p)(pixels)
57
58     lambda_violet = wavelength(violet)
59     print(f"Wavelength of violet line: {lambda_violet}")
60     print(f"Spectral resolution: {lambda_violet/0.4}")
61
62
63     def main() → None:
64         lt.plt_latex()
65         fit_wavelengths_over_px()
66
67
68     if __name__ == "__main__":
69         main()

```

extinction.py zum Erstellen der Extinktionsspektren:

```

1 from typing import Callable
2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 import pickle
5 import labtool as lt
6
7
8 def wavelength(pixels: np.ndarray) → np.ndarray:
9     with open("./02_Spektroskopie/python/data/wavelength_fit_pickle", "rb") as
10        file:
11            parameters = pickle.load(file)

```

```
11
12     def quadratic_function(a, b, c) → Callable:
13         return lambda x: a * x**2 + b * x + c
14
15     return quadratic_function(*parameters)(pixels)
16
17
18 def get_extinction() → np.ndarray:
19     with open("./02_Spektroskopie/python/data/Halo_pickle", "rb") as file:
20         intensity_halogene = pickle.load(file)
21     with open("./02_Spektroskopie/python/data/I_pickle", "rb") as file:
22         intensity_iodine = pickle.load(file)
23
24     return np.log10(intensity_halogene / intensity_iodine)
25
26
27 def plot_extinction() → None:
28     extinction = get_extinction()
29     pixels = np.arange(len(extinction))
30     wavelengths = wavelength(pixels)
31
32     fig, ax = plt.subplots()
33     ax.plot(wavelengths, extinction)
34     ax.set_title("Extinktionsspektrum einer Iod-Zelle vor einer Halogenlampe")
35     ax.set_xlabel(r"$\lambda$ / nm")
36     ax.set_ylabel("$E / 1$")
37     ax.grid()
38     fig.savefig("./02_Spektroskopie/python/plots/extinction.pdf")
39
40
41 def main() → None:
42     lt.pyplot()
43     plot_extinction()
44
45
46 if __name__ == "__main__":
47     main()
```

gitter_intensity.py zum Erstellen weiterer Extinktionsspektren sowie Wellenzahl-Plots, Wellenzahlendifferenz-Plots und Gesamtintensitäten:

```
1 import matplotlib.pyplot as plt
2 from util import readIn
3 from math import log10
4 import pickle
5 import numpy as np
6 from scipy.signal import find_peaks
7 import labtool as lt
8
9
10 lt.pyplot()
11
12
```

```
13 def wavelength(pixels: np.ndarray) → np.ndarray:
14     with open("./02_Spektroskopie/python/data/wavelength_fit_pickle", "rb") as file:
15         parameters = pickle.load(file)
16
17     def quadratic_function(a, b, c):
18         return lambda x: a * x**2 + b * x + c
19
20     return quadratic_function(*parameters)(pixels)
21
22
23 Halo_prism, I_prism = None, None
24 with open("./02_Spektroskopie/python/data/Halo_pickle", "rb") as f:
25     Halo_prism = pickle.load(f)
26 with open("./02_Spektroskopie/python/data/I_pickle", "rb") as f:
27     I_prism = pickle.load(f)
28
29
30 def E(wJod, woJod):
31     return -log10(wJod / woJod)
32
33
34 max_val = 65535
35
36 halogen = readIn("02_Spektroskopie/data/gitter/Halogen.txt", skiprows=17)
37 HG = readIn("02_Spektroskopie/data/gitter/HGAU.txt", skiprows=17)
38 Iod = readIn("02_Spektroskopie/data/gitter/Iod.txt", skiprows=17)
39
40 # Extinktion grating:
41 xlabel = r"$\lambda$ / nm"
42 ext = [E(x, y) for x, y in zip(Iod[1], halogen[1])]
43 plt.plot(halogen[0], ext, label="Gitterspektrograph")
44 plt.xlabel(xlabel)
45 plt.ylabel("$E / 1$")
46 plt.grid()
47 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/extinction_grating.pdf")
48 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/extinction_grating.png")
49 plt.clf()
50
51 # Extinktion prism
52 ext_prism = [E(x, y) for x, y in zip(I_prism, Halo_prism)]
53 plt.plot(wavelength(np.array(range(len(ext_prism)))), ext_prism)
54 plt.xlabel(xlabel)
55 plt.grid()
56 plt.ylabel("$E / 1$")
57 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/extinction_prism.pdf")
58 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/extinction_prism.png")
59 plt.clf()
60
61 # Peaks prism - sample from 505 nm - 550
62 wavelength_ = wavelength(np.array(range(len(ext_prism))))
63 x_sample, y_sample = wavelength_[13000:18000], ext_prism[13000:18000]
64 peaks, *_ = find_peaks(y_sample, distance=130, prominence=0.01)
```

```
65 x_peaks, y_peaks = [x_sample[i] for i in peaks], [y_sample[i] for i in peaks]
66 x_peaks_wavelengths = wavelength(np.array(x_peaks))
67 plt.plot(x_sample, y_sample)
68 plt.scatter(x_peaks, y_peaks, color="r", marker="x", label="lokale
69     Extinktionsmaxima") # type: ignore
70 plt.xlabel(xlab)
71 plt.ylabel("$E / 1$")
72 plt.grid()
73 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/peaks_prism.pdf")
74 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/peaks_prism.png")
75 plt.clf()
76
77 # Wavenumber prism
78 v = [1 / x * 10e6 for x in x_peaks] # scale to 1/cm
79 linspace_ = np.arange(len(v))
80 quad_fit = lt.CurveFit(lambda x, a, b, c: a * x**2 + b * x + c, linspace_, v)
81 a, b, c = lt.unp.uarray(quad_fit.p, quad_fit.u)
82 print(f"Diff fit params: a = {a}, b = {b}, c = {c}")
83 plt.scatter(linspace_, v, color="blue", marker="x", label="Wellenzahlen") #
84     type: ignore
85
86 def rnd(x):
87     return round(x, 2)
88
89
90 factor_x_squared = lt.u.ufloat(rnd(a.n), rnd(a.s))
91 factor_x = lt.u.ufloat(rnd(b.n), rnd(b.s))
92 constant = lt.u.ufloat(rnd(c.n), rnd(c.s))
93
94 l = rf"${{factor_x_squared:L}} \cdot x^2 + {{factor_x:L}} \cdot x + {{constant:
95 L}}$"
96 plt.plot(linspace_, quad_fit(linspace_), label=f"Quadratischer Fit: {l}")
97 plt.xlabel("Index / 1")
98 ylab = r"$\bar{\nu}_i / \text{si per centi meter}"
99 plt.ylabel(ylab)
100 plt.grid()
101 plt.xticks(list(range(0, 21, 2)))
102 plt.legend()
103 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/wavenumber_prism.pdf")
104 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/wavenumber_prism.png")
105 plt.clf()
106
107
108 # Wavenumber prism difference
109 diff = [(y - x) for x, y in zip(v[:-2], v[1:])]
110 linspace_ = np.arange(len(diff))
111 linear_fit = lt.CurveFit(lambda x, k, d: k * x + d, linspace_, diff)
112 k, d = lt.unp.uarray(linear_fit.p, linear_fit.u)
113 print(f"Diff fit params: k = {k}, d = {d}")
```

```
114 print(f"y-intersection: {d/k} ")
115 plt.scatter(linspace_, diff, color="blue", marker="x", label="Differenzen zw.
    Wellenzahlen") # type: ignore
116 ext_linspace_ = np.linspace(-1.35 * len(diff), len(diff))
117
118 factor_x = lt.u.ufloat(rnd(k.n), rnd(k.s))
119 constant = lt.u.ufloat(rnd(d.n), rnd(d.s))
120
121 l = rf"${{factor_x:L}} \cdot x + {{constant:L}}$"
122
123 plt.plot(ext_linspace_, linear_fit(ext_linspace_), label=f"Linearer Fit: {l}")
124 print(linear_fit(ext_linspace_)[:3])
125 plt.xlabel("Index / 1")
126 ylab = r"$\Delta \bar{\nu}_i / \text{si per centi meter}"
127 plt.ylabel(ylab)
128 plt.xticks(list(range(-25, 21, 5)))
129 plt.grid()
130 plt.legend()
131 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/wavenumber_prism_diff.pdf")
132 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/wavenumber_prism_diff.png")
133 plt.clf()
134
135
136 # Peaks - sample from 580 nm - 650 nm
137 x_sample, y_sample = halogen[0][800:1000], ext[800:1000]
138 peaks, *_ = find_peaks(y_sample, distance=15, prominence=0.001)
139 x_peaks, y_peaks = [x_sample[i] for i in peaks], [y_sample[i] for i in peaks]
140 plt.plot(x_sample, y_sample)
141 plt.scatter(x_peaks, y_peaks, color="r", marker="x", label="lokale
    Extinktionsmaxima") # type: ignore
142 plt.xlabel(xlab)
143 plt.ylabel("$E / 1$")
144 plt.grid()
145 plt.legend()
146 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/peaks_grating.pdf")
147 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/peaks_grating.png")
148 # plt.show()
149 plt.clf()
150
151
152 # Wellenzahl
153 v = [1 / x for x in x_peaks]
154 plt.plot(v)
155 plt.xlabel("Index")
156 ylab = r"$\bar{\nu}_i / \text{si per nano meter}"
157 plt.grid()
158 plt.ylabel(ylab)
159 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/wavenumber_grating.pdf")
160 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/wavenumber_grating.png")
161 plt.clf()
162
163 plt.plot(halogen[0], [x / max_val for x in halogen[1]], label="Halogen")
```

```

164 plt.plot(HG[0], [x / max_val for x in HG[1]], label="Hg")
165 l = r"Halogen \& Iod"
166 plt.plot(Iod[0], [x / max_val for x in Iod[1]], label=l)
167 plt.xlabel(xlab)
168 plt.ylabel("$I$ / 1")
169 plt.grid()
170 plt.legend()
171 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/intensity_comparison.pdf")
172 plt.savefig("02_Spektroskopie/python/plots/intensity_comparison.png")

```

util.py: util file mit kleinen Berechnungen für die Dissoziationsenergie:

```

1 import numpy as np
2 from uncertainties import ufloat
3
4
5 def readIn(path, skiprows=0):
6     lines = []
7     with open(path, "r", encoding="ISO-8859-1") as f:
8         lines = f.readlines()
9     if skiprows:
10         lines = lines[skiprows:]
11
12     L, I = [], []
13     for str_ in lines:
14         try:
15             str_ = str_.replace(",", ".")
16             l, i = str_.split("\t")
17             L.append(ufloat(l))
18             I.append(ufloat(i))
19         except:
20             pass
21     return L, I
22
23
24 if __name__ == "__main__":
25
26     def f(x):
27         return ufloat(-2.1, 0.4) * x - ufloat(52, 4)
28
29     def qf(x):
30         return ufloat(-0.97, 0.04) * x**2 - ufloat(52.2, 0.9) * x + ufloat
31         (19750, 4)
32
33     # E = h \cdot c \cdot \bar{\nu}
34     h, c = 6.62607015e-34, 299792458
35
36     def scheitelenergie(nu):
37         return h * c * nu
38
39     for i in np.linspace(-26, -24, 10):
40         print(i, f(i))
41
42     print("----")

```

```
42     print(qf(-25), abs(qf(-25 + 11) - qf(-25 - 11)))
43     print("Scheitelenergie")
44     E = scheitelenergie(ufloat(2045000, 8000)) # * 100 für SI Einheiten
45     E_ev = E / 1.602176634e-19
46     E_diss = E_ev - ufloat(0.970, 0.005)
47     print(E, E_ev, E_diss)
```