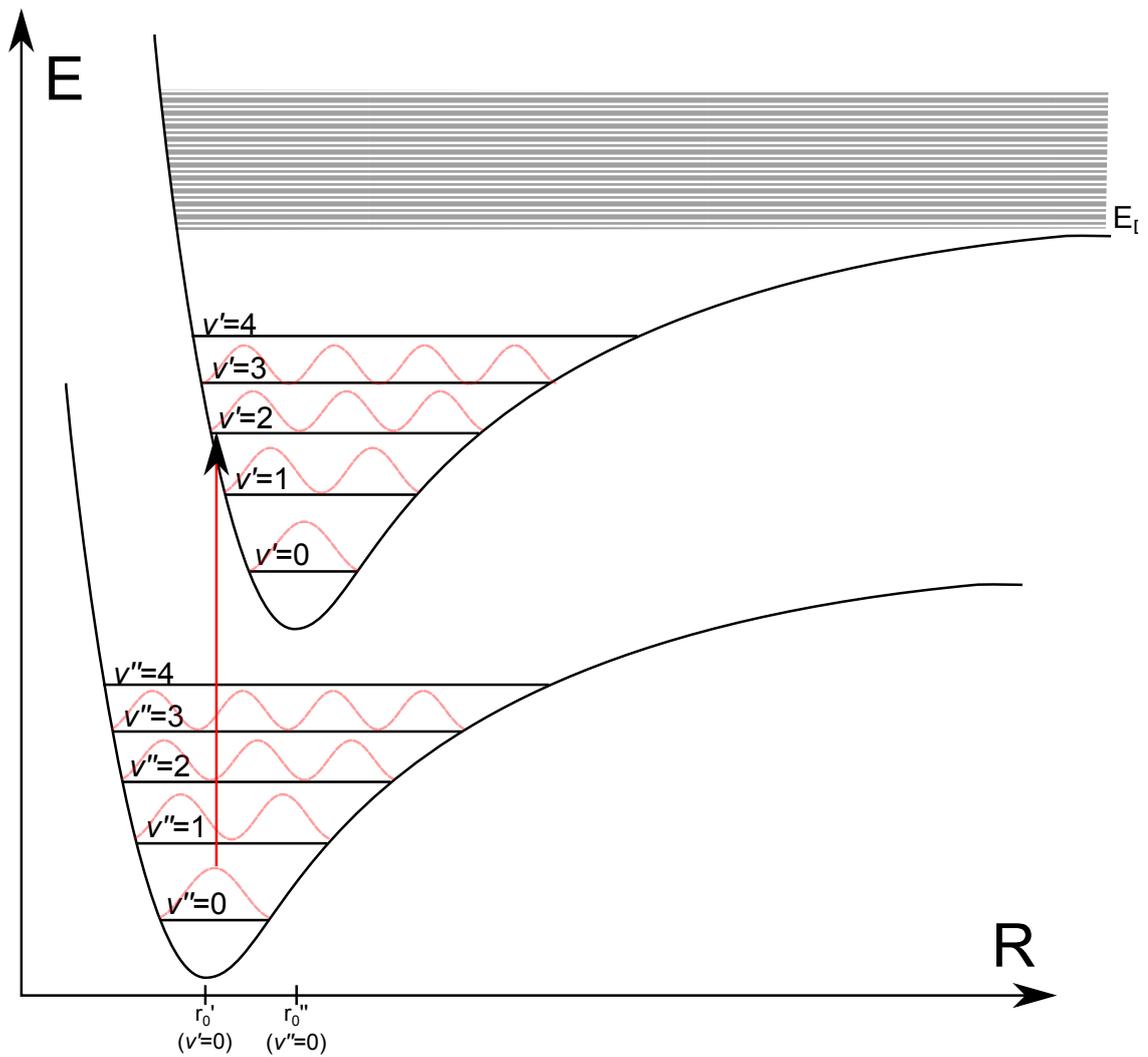


# Bandenspektrum von Jod

Dennis Getzkow & Julian Bergmann

26. Februar 2012



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theoretische Betrachtung</b>	<b>1</b>
1.1	Einleitung . . . . .	1
1.2	Größenordnung der Anregungsenergien . . . . .	1
1.2.1	Elektronen-Anregungszustände . . . . .	1
1.2.2	Schwingungs-Anregungszustände . . . . .	1
1.2.3	Rotations-Anregungszustände . . . . .	4
1.3	Nomenklatur der Zustände . . . . .	5
1.4	Optische Anregung . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Versuchsaufbau</b>	<b>8</b>
<b>3</b>	<b>Versuchsdurchführung und Auswertung</b>	<b>9</b>
3.1	Messwerte . . . . .	9
3.2	Bestimmung der Schwingungsquantenzahlen . . . . .	10
3.3	Dissoziationsenergie . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Anhang</b>	<b>17</b>
4.1	Literaturverzeichnis . . . . .	17
4.2	Quellen der Abbildungen . . . . .	17
4.3	Excel-Tabellenblätter . . . . .	18

# 1 Theoretische Betrachtung

## 1.1 Einleitung

Im Versuch *Bandenspektrum von Jod* soll mithilfe von photoelektrischer Absorption an molekularem Joddampf temperaturabhängig das Jod-Spektrum im Bereich von 500-600nm gemessen und daraus die Dissoziationsenergie ermittelt werden.

Um die durch das Experiment erhaltenen Daten sinnvoll auswerten zu können, ist es zunächst notwendig, die erwarteten Absorptionslinien theoretisch zu behandeln. Da wir hierbei molekulares Jod betrachten, wird zusätzlich zu der klassischen Atomphysik zu der Betrachtung der Anregungszustände der Elektronen auch die Betrachtung der übrigen Freiheitsgrade, Schwingung und Rotation, notwendig. Dabei benennen wir die oft stark auseinander liegenden Elektronen-Anregungszustände *Bandensystem*, die Schwingungszustände *Banden* und die Rotationszustände *Bandenlinien*.

Bei diesem deutlich detaillierteren Energie-Spektrum spricht man auch von dem sogenannten *Bandenspektrum*. Dabei liegt die Größenordnung der Elektronen-Zustände bekanntermaßen im eV-Bereich. Die Bestimmung der Größenordnung von Rotation und Schwingung ist dabei Teil des folgenden Kapitels, jedoch sind beide bereits ohne genauere Betrachtung von wesentlich kleinerer Größenordnung als die der Elektronen, da Banden das Bandensystem und Bandenlinien die Banden detaillieren.

## 1.2 Größenordnung der Anregungsenergien

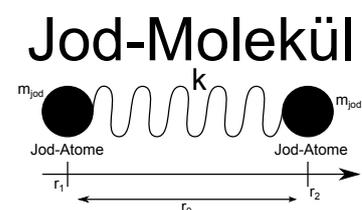
### 1.2.1 Elektronen-Anregungszustände

Wie bereits durch Untersuchungen u.a. bei Wasserstoff bekannt sein dürfte, liegen die Anregungszustände der Elektronen bei einigen eV.

Da wir in diesem Fall einen bindenden Zustand bei molekularem Jod, also 2 Jod-Atomen, betrachten, also eine höhere Bindungsenergie in diesem bindenden Zustand zu finden sein wird.

### 1.2.2 Schwingungs-Anregungszustände

Wie der Name bereits nahe legt, handelt es sich bei den *Schwingungszuständen* um die Energie der Schwingung im Jod-Molekül, genauer zwischen den beiden Jod-Atomen. Hierbei lässt sich im klassischen Sinne der Vorgang durch eine eindimensionale Darstellung zweier durch eine Feder



gekoppelter Massen darstellen. Weiterhin setzen wir die Ortskoordinaten der beiden Jod-Atome auf  $r_{1,2}$  und die *Gleichgewichtsabstand* der Atome auf  $r_0$ .

Die Massen haben dabei die Jod-Atom-Masse, die Feder wird durch unser Potential repräsentiert, welches zu unserer Bindungskraft führt. Diese Kraft ist in unserem Fall die Coulomb-Kraft, da es sich hierbei um Ionisationsbindung innerhalb des Moleküls handelt.

Nun stellen wir das allgemeine DGL-System für unseren Fall der Schwingung auf:

$$\begin{cases} I: & m_{jod}\ddot{r}_1 = k((r_2 - r_1) - r_0) \\ II: & m_{jod}\ddot{r}_2 = -k((r_2 - r_1) - r_0) \end{cases}$$

Diese lässt sich nun leicht entkoppelt darstellen:

$$\begin{cases} I: & m_{jod}(r_1 + r_2) = 0 \\ II: & m_{jod}(\ddot{r}_2 - \ddot{r}_1) = -2k((r_2 - r_1) - r_0) \end{cases}$$

Indem wir nun erkennen, dass  $r_2 - r_1$  der Abstand der Atome voneinander ist, beschreibt Gleichung II eine Schwingung des Abstandes der Atome um den Gleichgewichtsabstand. Führen wir nun für den Abstand der Atome die Variable  $r_a = r_2 - r_1$  ein, so ergibt sich als Lösungsansatz von II:

$$r_a(t) = r_0 + r_\alpha \cos(\omega t + \phi) \quad \text{mit} \quad \omega = \sqrt{\frac{2k}{m}}$$

Nun sollte noch die Federkonstante mittels der Coulombkraft ermittelt werden:

$$k = -\frac{\partial F}{\partial r} = -\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \right) = \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^3}$$

Hiermit lässt sich nun die Energie  $E = \hbar\omega$  abschätzen, wobei wir dabei von Abständen im Bereich von  $\text{\AA}$  ( $\sim 10^{-10}m$ ) und Massen im Bereich der atomaren Masseneinheit ( $\sim 10^{-27}kg$ ) ausgehen. Die Energie liegt dabei erwartungsgemäß unter 1eV, genauer im Bereich von Zehntel-Elektronenvolt.

Da man sich hier jedoch bereits in äußerst kleinen Maßstäben aufhält, ist es sinnvoll, das Problem auch quantenmechanisch zu betrachten. Hierbei muss zwangsläufig die *Schrödinger-Gleichung* gelöst werden, wobei wir mit  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{1}{2} m_{jod}$  die *reduzierte Masse* bezeichnen:

$$\left( \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) - E \right) f(r) = 0$$

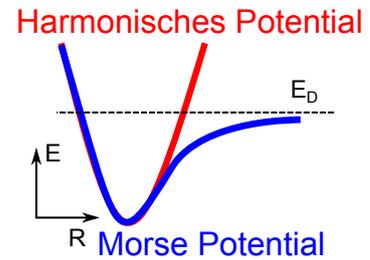
Entwickeln wir hierbei den Verlauf des Potentials um den Gleichgewichtsabstand, so erhalten wir ein Potential einer *harmonischen Schwingung*:

$$V(r) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \frac{V^{(i)}(r_0)}{d(r - r_0)^i} (r - r_0)^i \approx V(r_0) + \frac{1}{2} k (r - r_0)^2$$

Die daraus ersichtlichen Eigenenergiewerte sind dadurch:

$$E_\nu = \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}} \left( \nu + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \left( \nu + \frac{1}{2} \right)$$

Nun hat das harmonische Potential jedoch den Nachteil, dass es ab einer bestimmten Energie nicht mehr stimmen kann, da ab der sogenannten *Dissoziationsenergie*  $E_D$  das Molekül seine Bindung verliert. Um dem Folge zu leisten wurde das *Morse-Potential* eingeführt, welches die Dissoziationsenergie nur approximativ erreicht:

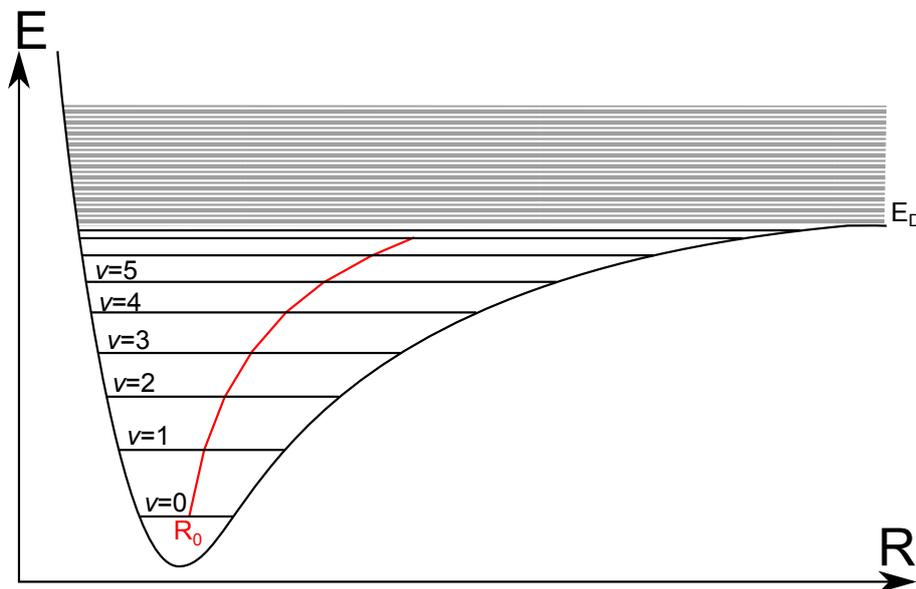


$$V_M(r) = E_D \left( 1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right)^2$$

Führen wir nun die Lösung für dieses Potential erneut aus, erhalten wir bessere Energieeigenwerte:

$$E_\nu = \sqrt{\frac{2E_D}{\mu}} \beta \hbar \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - \frac{\beta^2 \hbar^2}{2\mu} \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2 = hc\omega_e \left( \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - x_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2 \right)$$

Hierbei wurde  $\beta = \sqrt{\frac{k}{2E_D}}$  zusammengefasst und die *Schwingungskonstante*  $\omega_e$ , sowie die *Anharmonizitätskonstante*  $x_e$  eingeführt.



Schwingungsbanden innerhalb des Morse-Potentials als elektrisches Bandensystem

Wie von der quantenmechanischen Betrachtung erwartet, ist nun die Energie quantisiert:

$$\Delta E = hc\omega_e (1 - 2x_e(\nu + 1))$$

An dieser Stelle hilft uns nun die Tatsache, dass mit steigender Energiewert-Indexzahl auch die Schwingungsenergie zunehmen muss, wodurch folgt, dass

$$\nu \leq \frac{1}{2x_e} - \frac{1}{2} \quad ,$$

was wiederum zur maximalen Schwingungsenergie

$$E_{\nu_{max}} = E_D = hc\omega_e \left( \frac{1}{2x_e} - x_e \left( \frac{1}{2x_e} \right) \right)$$

führt, womit wir zu unserer Anharmonizitätskonstanten kommen:

$$x_e = \frac{hc\omega_e}{4E_D}$$

Somit folgt für die Besetzung der Schwingungszustände:

$$\rho_\nu = \frac{1}{Z} e^{\frac{\omega_e}{kT}((\nu+\frac{1}{2})-x_e(\nu+\frac{1}{2})^2)}$$

### 1.2.3 Rotations-Anregungszustände

Für die Abschätzung der Rotationsenergie begeben wir uns gleich in das quantenmechanische Umfeld. Hier benutzen wir den Bahndrehimpuls  $L = \Theta\omega = n\hbar$  mit dem Trägheitsmoment  $\Theta$ , was umgestellt zur Energie führt:

$$E = \frac{1}{2}\Theta\omega^2 = \frac{1}{2}\frac{L^2}{\Theta} = \frac{n^2\hbar^2}{2\Theta}$$

Außerdem gilt  $\Theta = \mu r^2 = \frac{1}{2}m_{jod}r^2$ :

$$E = \frac{n^2\hbar^2}{2\Theta} = \frac{\hbar^2 n^2}{m_{jod}r^2}$$

Setzen wir hier wiederum den Ansatz aus der Schrödingergleichung an, erhalten wir in Kugelkoordinaten

$$\left( \frac{L^2}{2\mu r^2} + V_k + E_{el} \right) f(r)Y(\theta, \phi) = E f(r)Y(\theta, \phi) \quad ,$$

was mit den  $L^2$ -Eigenwerten  $\hbar^2 J(J+1)$  zu folgender Gleichung führt:

$$\left( \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu r^2} + V_k + E_{el} \right) f(r) = E f(r)$$

Hieraus lässt sich erkennen, dass unsere Rotationsenergie noch den Korrekturfaktor  $J(J+1)$  benötigt.

Da allerdings die Rotationsenergie zu gering ist, als dass mit der Auflösung unserer

Ausrüstung eine Aufspaltung beobachtet werden könnte, wird sie im Folgenden ignoriert.

### 1.3 Nomenklatur der Zustände

Wie auch für Zustände in Atomen lässt sich für die Energiezustände in Molekülen eine geeignete Nomenklatur finden. Hierbei halten uns allerdings einige geänderte Umstände davon ab, die Nomenklatur ohne Änderungen zu übernehmen:

Da Moleküle im Allgemeinen nicht kugelsymmetrisch sind, müssen *Drehimpuls*- und *Spinquantenzahl* neu betrachtet werden. Hierbei hilft man sich damit, dass die Projektion dieser Quantenzahlen auf die Molekülachse wiederum eine gute Quantenzahl ist und benutzt diese stattdessen.

Hierbei führt man auch neue Symbole in analoger Weise zu Atomen ein:

Die Projektion des Drehimpulses wird  $\Lambda$  genannt und kann von  $-L$  bis  $+L$  laufen. Der Wert von  $\Lambda$  wird dabei allerdings durch Symbole ausgedrückt ( $0=\Sigma$ ,  $1=\Pi$ ,  $2=\Delta$ ,  $3=\Gamma$ ).

Die Projektion des Spins wird hingegen  $\Sigma$  genannt, wobei man noch  $\Omega := \Lambda + \Sigma$  definiert.

Da es jedoch auch hier noch Multiplizitäten gibt, ist auch das Notieren des Spins von Bedeutung, weswegen die schlussendliche Termsymbolik wie folgt lautet:

$$^{2S+1}\Gamma_{\Omega}$$

Weiterhin bildet man die Quantenzahl  $\lambda = |m_l|$ , da die Projektion auf die Molekülachse in unserem zweiatomigen Molekül die Energien von  $\pm m_l$  gleich macht.

Hinzu kommen außerdem weitere Symmetrie-Eigenschaften, da Moleküle im Allgemeinen wesentlich komplexere Formen einnehmen als einzelne Atome. Dazu zählt das Verhalten der Eigenfunktion von Molekülen mit unterschiedlichen Kernen bei *Inversion* am Symmetriezentrum des durch die Kerne erzeugten elektrischen Feldes, wobei ein notiertes (u) einen Vorzeichenwechsel bedeutet, ein (g) entsprechend keine Veränderung.

Auch wird die Inversion der Elektronen am Koordinatenursprung betrachtet, wobei hier ein - für Vorzeichenwechsel der Eigenfunktion, ein + analog zu (g) notiert wird.

### 1.4 Optische Anregung

Durch die eben behandelten Aufspaltungen des Bandensystems, also neben den Anregungen der elektrischen Zustände auch die der Schwing- und Rotationszustände, erhalten wir nun äußerst linienreiche Spektren, die wir *Bandenspektren* nennen. Hierbei

müssen wir jedoch auch beachten, dass nicht nur die Existenz eines Energieüberganges eine Rolle spielt, sondern auch die Unterdrückung dieses Übergangs bzw. die *Auftrittswahrscheinlichkeit*.

Hierbei gilt, dass Dipolstrahlung gewissen Auswahlregeln unterliegt, hauptsächlich  $\Delta J \in \{-1, 0, 1\}$ , aber auch  $\Delta \Gamma \in \{-1, 1\}$  und  $\Delta \Sigma = 0$ . Letztere beiden Auswahlregeln sind jedoch nur schwach und können bei starker *Spin-Bahn-Kopplung* verletzt werden. Zudem gilt hier auch die *Paritätserhaltung*, genauer:

$$\begin{aligned} u &\leftrightarrow g && \text{gleiche Kernladung} \\ - &\leftrightarrow + && \text{beliebige Kernladung} \end{aligned}$$

Diese Auswahlregeln helfen uns bislang allerdings nicht, auch die Übergänge der Schwingzustände hinreichend genau zu beschreiben. Darum versuchen wir nun mithilfe der *Born-Oppenheimer-Näherung* weiter zu kommen.

Nach dieser Näherung lässt sich die Energie der Elektronen getrennt von der Kernbewegung betrachten, da sich die Elektronen durch ihre geringere Masse wesentlich schneller im Potential bewegen als die Kerne. Dies führt uns zu dem *Franck-Condon-Prinzip*. Durch unsere Näherung verändert sich die Kernbahn während des schnellen Elektronenüberganges kaum, sodass wir in unserem Bandensystem (Energie gegen Kernposition) einen Übergang durch eine senkrechte Linie darstellen können.

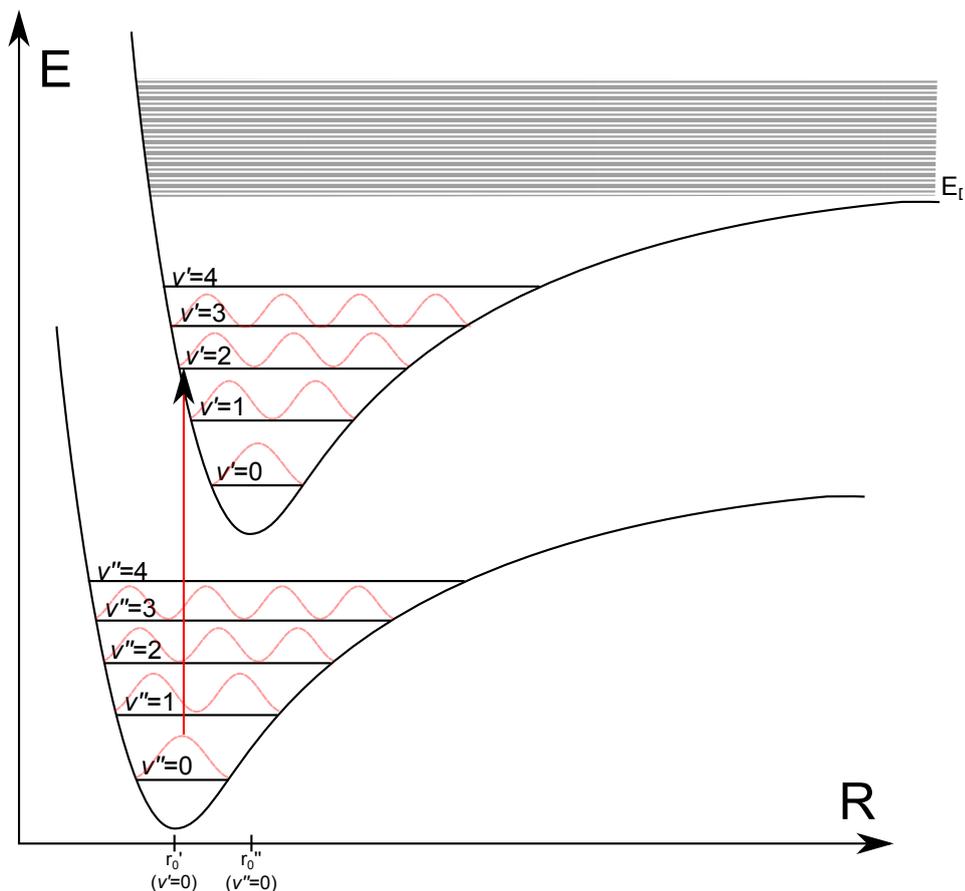
Dabei befindet sich der Anfang dieser Linie bevorzugt an einem *Umkehrpunkt der Schwingungsniveaus*, im Diagramm oft durch sinusartige Wellen-Niveaus dargestellt, da hier die Elektronen am längsten verweilen und somit die Übergangswahrscheinlichkeit am größten ist.

Das Problem der Übergangswahrscheinlichkeit lässt sich auch hier wieder quantenmechanisch betrachten: Wir benutzen hierbei den *Dipoloperator*  $P = -e \sum_i \vec{r}_i$ , da die Übergangswahrscheinlichkeit etwa  $|\langle \psi' | P | \psi'' \rangle|^2$  entspricht.  $\vec{r}_i$  ist dabei die Position des jeweiligen Elektrons,  $\langle \psi' |$  der Zustand im unteren,  $|\psi'' \rangle$  der Zustand im oberen Schwingungsniveau. Wählen wir den Separationsansatz  $\psi = \psi_{el} \psi_{schw}$  folgt:

$$\langle \psi' | P | \psi'' \rangle = \langle \psi'_{el} | P | \psi''_{el} \rangle \langle \psi'_{schw}(r - r'_0) | \psi''_{schw}(r - r''_0) \rangle$$

Dabei stellt  $\langle \psi'_{el} | P | \psi''_{el} \rangle$  lediglich die Wahrscheinlichkeit für elektrische Zustände dar, ist also innerhalb einer festen Bande konstant.  $\langle \psi'_{schw}(r - r'_0) | \psi''_{schw}(r - r''_0) \rangle$ , das *Überlappungsintegral*, hingegen wächst entsprechend der Überlappung von  $\psi'$  und  $\psi''$  an. Dies hat wie erwartet die Folge, dass die Schwingungsfunktionen ihre Maxima beim Schnittpunkt der Potentialkurve mit dem Schwingungsniveau haben.

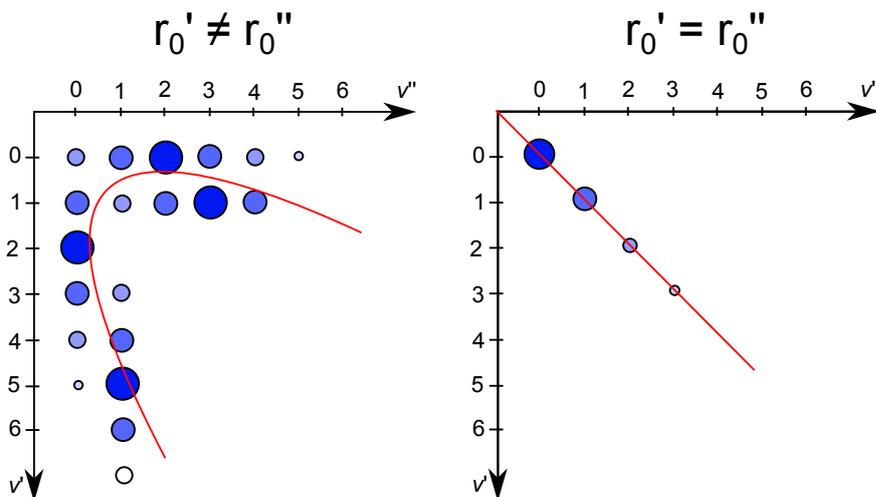
Im Grundzustand ist dies nicht der Fall, da hier das Maximum beim mittleren Kernabstand  $r_0$  liegt, was ebenfalls als Folgerung der Gleichung eine besonders hohe Übergangswahrscheinlichkeit bedeutet.



Franck-Condon-Prinzip:

Übergang zwischen Bandensystemen über festgehaltenes R

Um hier einen besseren Überblick über die verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten und damit über die Intensitäten im schlussendlich erhaltenen Diagramm zu erhalten, lässt sich  $v'$  gegen  $v''$  auftragen, was bei  $r'_0 \neq r''_0$  zu einer sogenannten *Condon-Parabel* führt, während der Spezialfall, dass die Banden im Bandensystem genau übereinander liegen ( $r'_0 = r''_0$ ) zu einer Geraden führt.



Franck-Condon-Prinzip:

Übergang zwischen Bandensystemen über festgehaltenes R

## 2 Versuchsaufbau

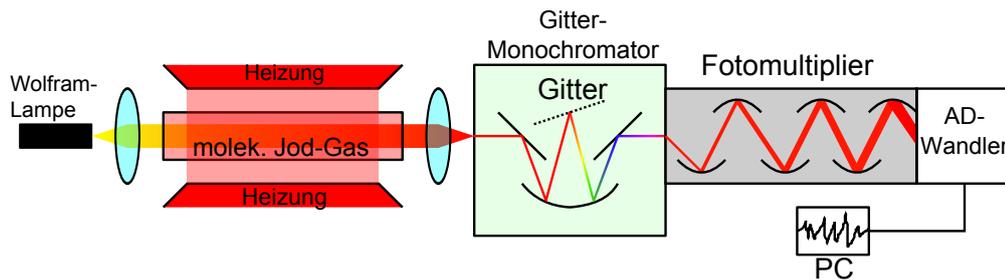


Abbildung 1: Der Versuchsaufbau

Die Abbildung 1 gibt den im Versuch verwendeten Aufbau wieder. Wir nutzen das Licht einer Wolfram-Glühlampe, welches mittels eines Kondensators parallel gebündelt wird, ehe es auf unsere Probe trifft. Bei letzterer handelt es sich um Joddampf innerhalb einer Glasküvette. Diese ist von einem Heizmantel umschlossen; dadurch ist es uns möglich, dass Jod während unseres Versuchs erhitzt werden kann.

Nach der Glasküvette wird das Licht auf den Eintrittsspalt des Gittermonochromators fokussiert, wo es dann spektral zerlegt wird. Dadurch wird es uns möglich Aussagen darüber zu treffen, inwieweit Licht einer bestimmten Wellenlänge von dem Joddampf emittiert bzw absorbiert wird. Natürlich wird auch das Licht, welches die Probe ungehindert durchläuft, aufgenommen.

Zur Untersuchung verschiedener Wellenlängen, ist der Monochromator mit einem Schrittmotor verbunden, der dafür Sorge trägt, dass wir den gewünschten Wellenlängenbereich von 500nm bis 600nm untersuchen können. Dafür wird der Gittermonochromator während einer Messung kontinuierlich gedreht. Die Steuerung erfolgt dabei - genau wie die Speicherung und Analyse der Daten - über den PC. Da der PC nicht in der Lage ist optische Signale zu deuten, nutzen wir ein PSEV. Dieses wandelt die Signale in elektrische um. Diese Signale sind in der Größenordnung von  $\mu A$ . Aber auch dies reicht noch nicht, um unsere Daten (über einen A/D-Wandler) am PC zu verarbeiten.

Das elektrische Signal muss noch in ein Spannungssignal umgewandelt werden. Ferner müssen wir das Signal verstärken und den Offset herausfiltern. Für das eben beschriebene benötigen wir die zusätzlichen Schaltelemente, deren Anschluss einen gewissen Aufwand erfordert. Dies wird aber mit genaueren Analysen wieder wett gemacht, die zudem auch relativ einfach durchzuführen sind. Betrachten wir nun unsere Versuchsdurchführung.

### 3 Versuchsdurchführung und Auswertung

#### 3.1 Messwerte

Wir beginnen mit dem Erhitzen der Jodprobe mittels der oben genannten Heizkörper. Sobald die Probe erhitzt ist, schalten wir die Heizung wieder aus und starten unsere Messungen. Durch das Erhitzen ändert sich die energetische Lage der Bandlinien des  $J_2$  nicht. Allerdings steht uns dann mehr Joddampf innerhalb der Glasküvette zur Verfügung, wodurch die Bandenspektren des Jods leichter zu erkennen sind.

Die im Versuch aufgenommenen Spektren kann man Abbildung 2 und 3 entnehmen. Dabei stellt Abbildung 2 unsere erste Messung dar und somit hatte die Glasküvette bei dieser Messung die höchste Temperatur. Die zweite Abbildung zeigt dementsprechend die Ergebnisse einer späteren Messung mit einer niedrigeren Temperatur.

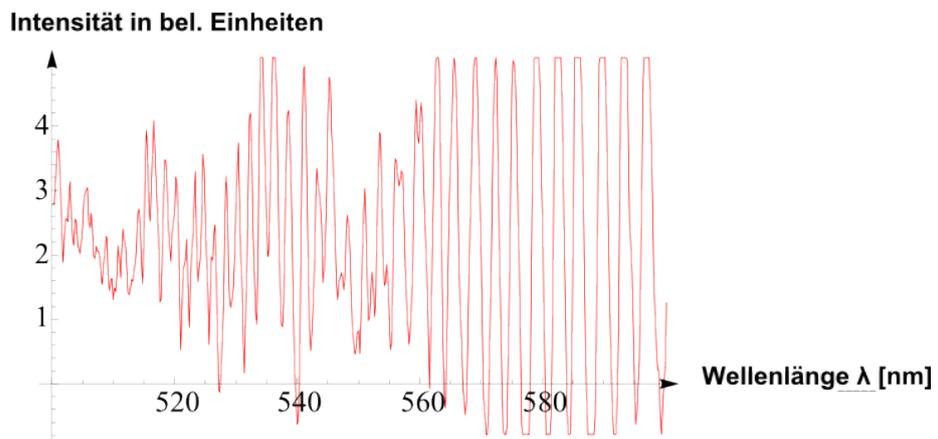


Abbildung 2: Schwingungsspektrum von Jod (geheizt)

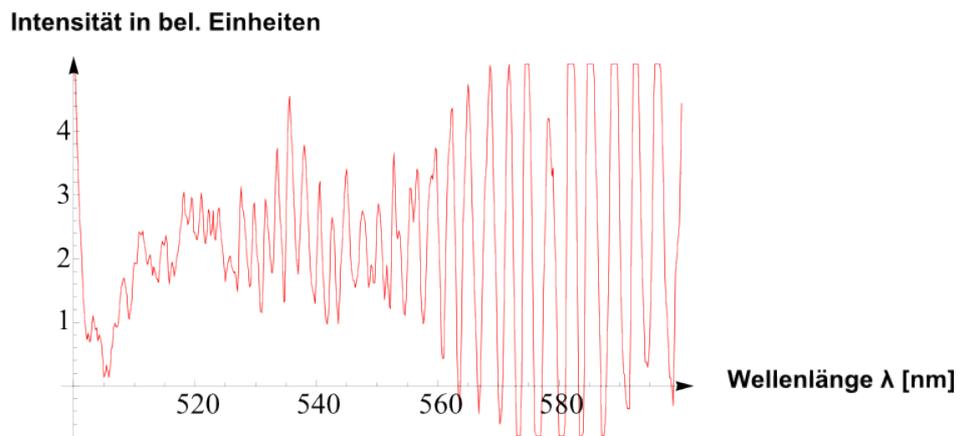


Abbildung 3: Schwingungsspektrum von Jod (ungeheizt)

### 3.2 Bestimmung der Schwingungsquantenzahlen

Für die Berechnung der Schwingungsenergie  $E_{vib}$  verwenden wir folgende Formel:

$$E_{vib} = hc\omega_e \left[ \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - x_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2 \right]$$

Dabei stellt  $\omega_e = 128\text{cm}^{-1}$  die Schwingungskonstante,  $x_e$  die Anharmonizitätskonstante und  $\nu$  die Schwingungsquantenzahl dar. Betrachten wir benachbarte  $E_{vib}$ ; dann können wir schreiben:

$$\Delta E_{vib} = E_{vib}(\nu + 1) - E_{vib}(\nu) = hc\omega_e(1 - 2x_e(\nu + 1))$$

Wie man leicht sieht, besteht zwischen den verschiedenen  $E_{vib}$  ein linearer Zusammenhang. Diesen machen wir uns nachfolgend zu nutze:

Wir legen zunächst willkürlich Schwingungsquantenzahlen fest und ordnen sie den ermittelten Abständen zwischen zwei Schwingungszuständen  $\Delta\frac{1}{\lambda}$  zu. Die wahren Quantenzahlen erhalten wir, indem wir das Koordinatensystem solange verschieben bis eine ebenfalls erstellte Regressionsgerade bei  $\nu = -1$  die Ordinate ( $\Delta\frac{1}{\lambda}$ ) mit einem Achsenabschnitt von  $128\text{cm}^{-1}$  schneidet.

Da sich die Abstände zwischen zwei Quantenzahlen durch unsere willkürliche Zuordnung nicht ändern, können wir so auch die restlichen echten Quantenzahlen ermitteln. In den Abbildungen stellen die oberen Koordinatenbeschriftungen stets die willkürlichen Quantenzahlen und die unteren Beschriftungen die richtigen Quantenzahlen dar.

Der Übersicht halber, haben wir unsere Erkenntnisse auch in Form von Tabellen niedergeschrieben. Dabei unterscheiden wir zwischen den verschiedenen Messungen und Bandensystemen. Im Übrigen nehmen wir für die Verschiebung des Koordinatensystems einen Fehler von  $\Delta\nu = \pm 1$  an.

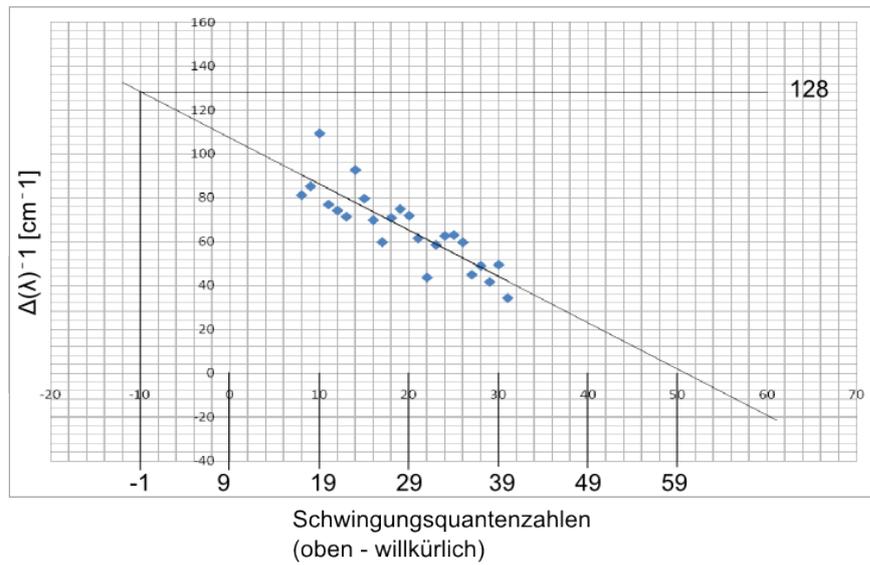


Abbildung 4: erste (geheizte) Messung / erste Bande

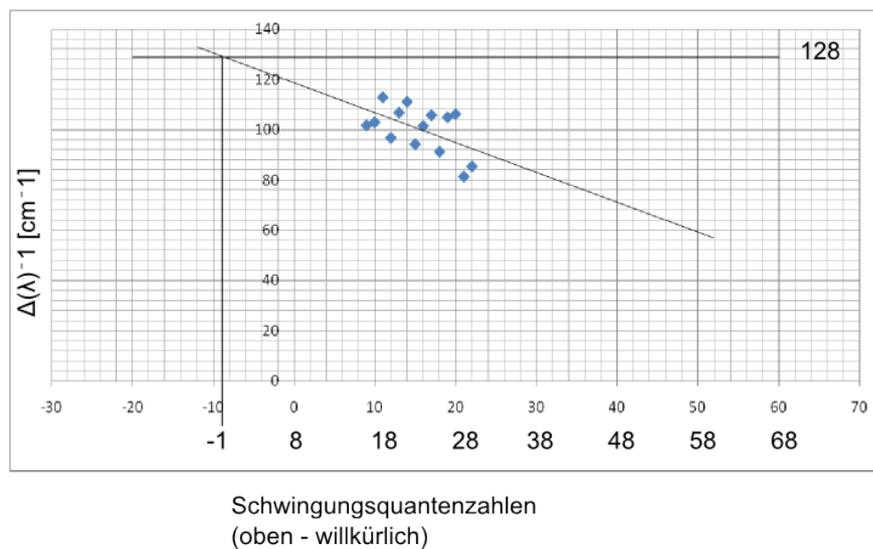


Abbildung 5: erste (geheizte) Messung / zweite Bande

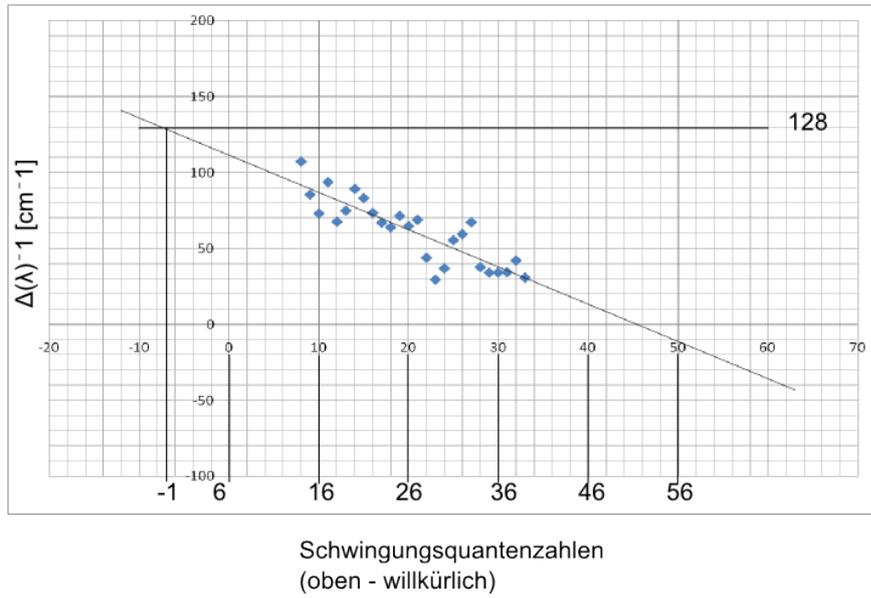


Abbildung 6: zweite Messung / erste Bande

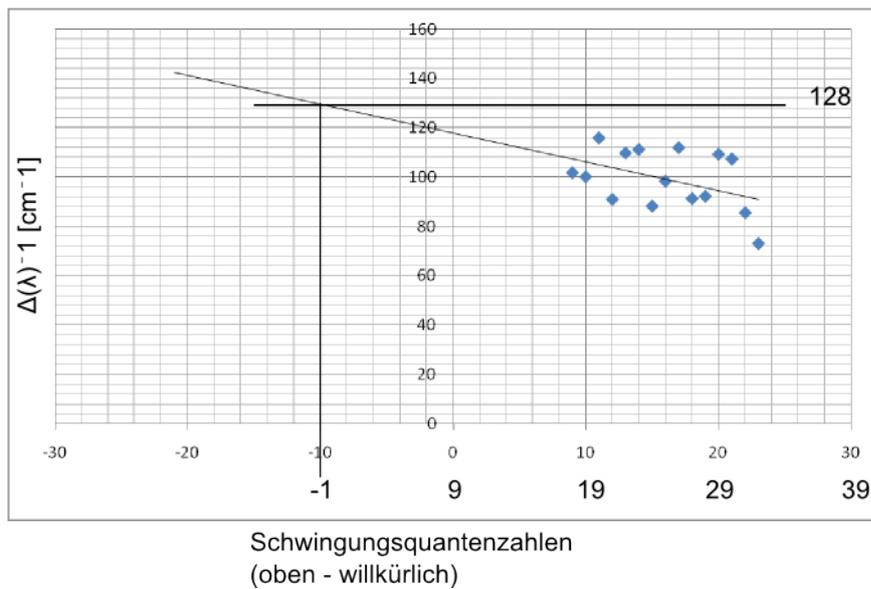


Abbildung 7: zweite Messung / zweite Bande

erste (geheizte) Messung $\lambda[nm]$	$\frac{1}{\lambda}[cm^{-1}]$	$\Delta(\frac{1}{\lambda})[cm^{-1}]$	willkürliches $\nu$	$\nu$
510,8	19577,1339	34,4331063	31	41
511,7	19542,7008	49,5234133	30	40
513,0	19493,1774	41,7088020	29	39
514,1	19451,4686	49,0626875	28	38
515,4	19402,4059	45,0694678	27	37
516,6	19357,3364	59,7679241	26	36
518,2	19297,5685	63,1003394	25	35
519,9	19234,4682	62,6890259	24	34
521,6	19171,7791	58,6292940	23	33
523,2	19113,4198	43,7371850	22	32
524,4	19069,4127	61,6194669	21	31
526,1	19007,7932	71,9855830	20	30
528,1	18935,8076	75,0003696	19	29
530,2	18860,8072	70,8786443	18	28
532,2	18789,9286	59,8293287	17	27
533,9	18730,0993	69,9014714	16	26
535,9	18660,1978	79,7444350	15	25
538,2	18580,4534	92,7476873	14	24
540,9	18487,7057	71,4994142	13	23
543,0	18416,2063	74,3133782	12	22
545,2	18341,8929	77,0527007	11	21
547,5	18264,8402	109,429870	10	20
550,8	18155,4103	85,2982776	9	19
553,4	18070,1120	81,2651198	8	18
550,8	18155,4103	85,2982776	22	30
553,4	18070,1120	81,2651198	21	29
555,9	17988,8469	106,157358	20	28
559,2	17882,6896	104,911779	19	27
562,5	17777,7778	91,1842157	18	26
565,4	17686,5936	105,721551	17	25
568,8	17580,8720	101,410379	16	24
572,1	17479,4616	94,2043308	15	23
575,2	17385,2573	111,116690	14	22
578,9	17274,1406	106,758637	13	21
582,5	17167,3820	96,7093897	12	20
585,8	17070,6726	112,897445	11	19
589,7	16957,7751	102,895652	10	18
593,3	16854,8795	101,654492	9	17
596,9	16753,2250		8	16

zweite (ungeheizte) Messung $\lambda[nm]$	$\frac{1}{\lambda}[cm^{-1}]$	$\Delta(\frac{1}{\lambda})[cm^{-1}]$	willkürliches $\nu$	$\nu$
510,7	19580,9673	30,6251688	33	39
511,5	19550,3421	41,9535239	32	38
512,6	19508,3886	34,1919177	31	37
513,5	19474,1967	34,0722726	30	36
514,4	19440,1244	33,9532544	29	35
515,3	19406,1712	37,5870059	28	34
516,3	19368,5842	67,2909699	27	33
518,1	19301,2932	59,4228768	26	32
519,7	19241,8703	55,3776007	25	31
521,2	19186,4827	36,7416559	24	30
522,2	19149,7511	29,2921622	23	29
523,0	19120,4589	43,7706041	22	28
524,2	19076,6883	68,8950917	21	27
526,1	19007,7932	64,8115699	20	26
527,9	18942,9816	71,4964394	19	25
529,9	18871,4852	63,8869162	18	24
531,7	18807,5983	66,9685845	17	23
533,6	18740,6297	73,4652274	16	22
535,7	18667,1645	83,2581206	15	21
538,1	18583,9063	89,3622276	14	20
540,7	18494,5441	74,9456567	13	19
542,9	18419,5985	67,6072617	12	18
544,9	18351,9912	93,8206597	11	17
547,7	18258,1705	73,0459632	10	16
549,9	18185,1246	85,5770568	9	15
552,5	18099,5475	107,464028	8	14
547,7	18258,1705	73,0459632	23	32
549,9	18185,1246	85,5770568	22	31
552,5	18099,5475	107,464028	21	30
555,8	17992,0835	109,399927	20	29
559,2	17882,6896	92,2608072	19	28
562,1	17790,4287	91,3137051	18	27
565,0	17699,1150	112,059117	17	26
568,6	17587,0559	98,7235379	16	25
571,8	17488,6324	88,2495805	15	24
574,7	17400,3828	111,309503	14	23
578,4	17289,0733	109,894470	13	22
582,1	17179,1788	91,0038523	12	21
585,2	17088,1750	116,009335	11	20
589,2	16972,1656	100,223688	10	19
592,7	16871,9420	101,859797	9	18
596,3	16770,0822		8	17

### 3.3 Dissoziationsenergie

Bekanntermaßen ist die Dissoziationsenergie:

$$E_D = \frac{hc}{\lambda_k} - E_{At} = E_K - E_{At}$$

Dabei ist  $E_{At} = 0,940eV$ , weswegen wir nur noch  $E_K = \frac{hc}{\lambda_k}$  benötigen.

Also bestimmen wir aus unseren Messungen nun die Konvergenzstelle des ersten Bandensystems. Hierfür bedienen wir uns der Levenberg-Marquardt-Methode:

$$\Delta\lambda = \left( \frac{\lambda - \lambda_k}{b} \right)^c$$

Durch die Bestimmung von  $\lambda_k$  werden wir auch  $E_K$  bestimmen können. Aus unseren Messungen ist es uns möglich  $\Delta\lambda$  zu berechnen, indem wir die ermittelten Abstände zwischen den Intensitätsmaxima unserer Messungen betrachten.

Die Parameter  $b$ ,  $c$  und  $\lambda_k$  sind nun so zu wählen, dass der Unterschied zwischen den errechneten (mit der Methode von Levenberg und Marquardt) und den gemessenen Werten minimal wird. Um dies zu erreichen bedienen wir uns der „Solver“-Funktion von Excel.

Damit erhalten wir folgende Werte:

geheizt	$\lambda_k$	493,478996nm
	$b$	15,4723877
	$c$	0,69241279
ungeheizt	$\lambda_k$	498,882551nm
	$b$	15,957729
	$c$	0,78422537

Die graphische Auswertung kann Abbildung 8 und 9 entnommen werden:

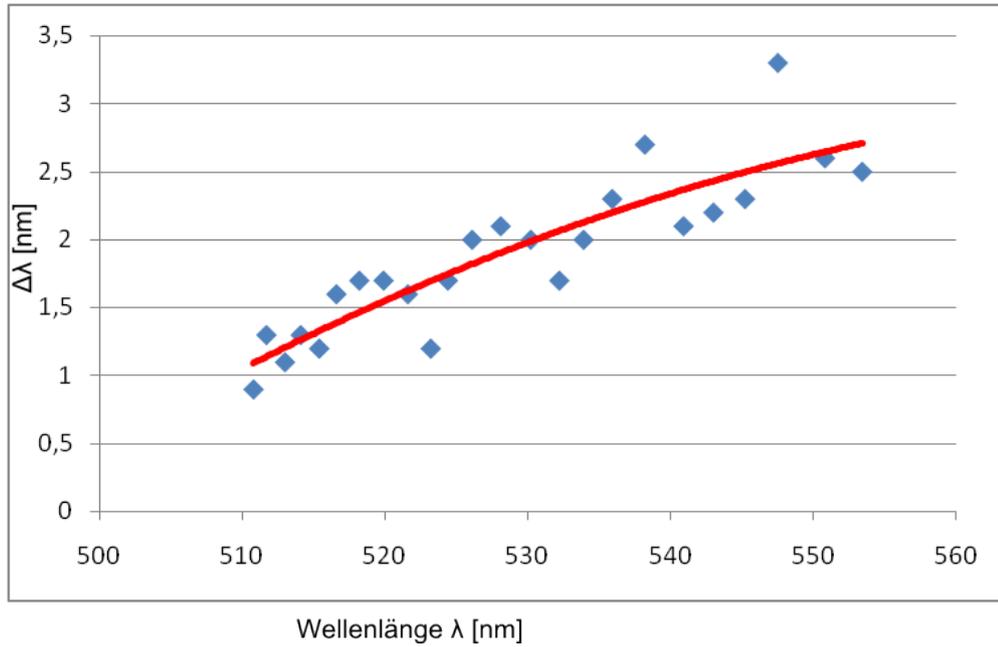


Abbildung 8: Bestimmung der Konvergenzgrenze (geheizt)

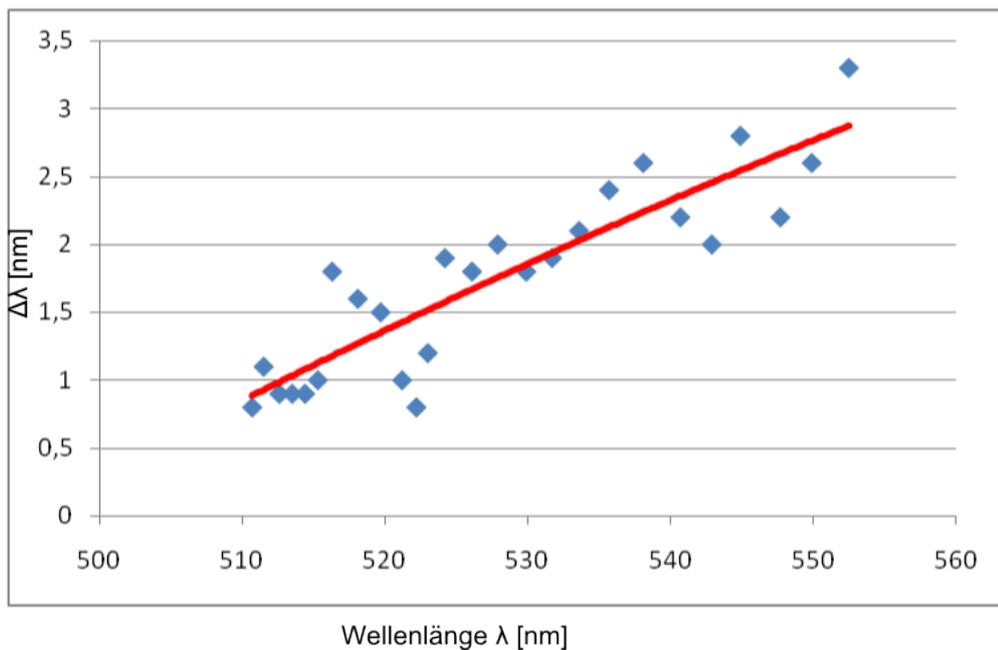


Abbildung 9: Bestimmung der Konvergenzgrenze (ungeheizt)

Nun wollen wir uns aber der Dissoziationsenergie zuwenden. Wir haben oben ermittelt, dass  $\lambda_k \approx 493,5\text{nm} \pm 12,5\text{nm}$  (geheizt) bzw.  $\lambda_k \approx 498,9\text{nm} \pm 14,3\text{nm}$  (ungeheizt). Der Fehler wurde dabei graphisch ermittelt.

Berechnen wir nun  $E_D$ :

Für den Fehler ergibt sich aus dem „Kurvenanpassen“  $\frac{\Delta E_D}{E_D} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda} \rightarrow \Delta E_D = E_D \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$ :

	$E_D$	Fehler $\Delta E_D$	Gesamtfehler (s.u)
geheizt	$1,572\text{eV}$	$\pm 0,039\text{eV}$	$\pm 0,043\text{eV}$
ungeheizt	$1,545\text{eV}$	$\pm 0,044\text{eV}$	$\pm 0,048\text{eV}$

Nicht beachtet haben wir bislang den Fehler beim Bestimmen der Wellenlänge mittels Gittermonochromator. Für diesen nehmen wir  $1\text{nm}$  an.

Ferner gibt es noch einen Fehler verursacht durch die Verschiebung des Bandpasses von etwa  $0,2\text{nm}$ .

Insgesamt erhalten wir einen Fehler von  $0,039\text{eV} + 0,004\text{eV} = 0,043\text{eV}$  für die erste und  $0,044\text{eV} + 0,004\text{eV} = 0,048\text{eV}$  für die zweite Messung.

Halten wir abschließend noch unsere Ergebnisse fest:

	$E_D$	$\lambda_k$
erste (geheizte) Messung	$1,572\text{eV} \pm 0,043\text{eV}$	$\lambda_k \approx 493,5\text{nm} \pm 12,5\text{nm}$
zweite (ungeheizte) Messung	$1,545\text{eV} \pm 0,048\text{eV}$	$\lambda_k \approx 498,9\text{nm} \pm 14,3\text{nm}$

## 4 Anhang

### 4.1 Literaturverzeichnis

- B.Weiß. Schwingungsspektrum von  $J_2$ -Molekülen — Ein Praktikumsexperiment. 1994.
- Versuchsanleitung

### 4.2 Quellen der Abbildungen

Alle Abbildungen wurden durch die Autoren erstellt, zum Teil stark an den oben aufgeführten Literaturangaben orientiert.

### 4.3 Excel-Tabellenblätter

geheizt		ungeheizt		Konstanten	
$\lambda$ [nm]	$\Delta\lambda$ [nm]	$\lambda$ [nm]	$\Delta\lambda$ [nm]		
Erstes Bandensystem		Erstes Bandensystem		geheizt	
510,8	0,9	510,7	0,8	k	493,478996
511,7	1,3	511,5	1,1	b	15,4723877
513	1,1	512,6	0,9	c	0,69241279
514,1	1,3	513,5	0,9	ungeheizt	
515,4	1,2	514,4	0,9	k	498,882551
516,6	1,6	515,3	1	b	15,9547729
518,2	1,7	516,3	1,8	c	0,78422537
519,9	1,7	518,1	1,6		
521,6	1,6	519,7	1,5		
523,2	1,2	521,2	1		
524,4	1,7	522,2	0,8		
526,1	2	523	1,2		
528,1	2,1	524,2	1,9		
530,2	2	526,1	1,8		
532,2	1,7	527,9	2		
533,9	2	529,9	1,8		
535,9	2,3	531,7	1,9		
538,2	2,7	533,6	2,1		
540,9	2,1	535,7	2,4		
543	2,2	538,1	2,6		
545,2	2,3	540,7	2,2		
547,5	3,3	542,9	2		
550,8	2,6	544,9	2,8		
553,4	1,4	547,7	2,2		
		549,9	2,6		
		552,5	3,3		
Zweites Bandensystem		Zweites Bandensystem			
555,9	3,3	555,8	3,4		
559,2	3,3	559,2	2,9		
562,5	2,9	562,1	2,9		
565,4	3,4	565	3,6		
568,8	3,3	568,6	3,2		
572,1	3,1	571,8	2,9		
575,2	3,7	574,7	3,7		
578,9	3,6	578,4	3,7		
582,5	3,3	582,1	3,1		
585,8	3,9	585,2	4		
589,7	3,6	589,2	3,5		
593,3	3,6	592,7	3,6		
596,9		596,3			

Excel-Tabellenblatt 1 zur Berechnung von  $\lambda_k$

Gleichung	gerechn. $\Delta\lambda$ [nm]	geh. Differenz	Differenz^2	relative Fehle	Summe rel.F.
$\Delta\lambda = ((\lambda - \kappa) / b)^c$	1,08128233	0,18128233	0,03286328	0,04057195	1,31203794
	1,11988045	-0,18011955	0,03244305	0,01919707	
	1,17461481	0,07461481	0,00556737	0,00460113	
	1,22005721	-0,07994279	0,00639085	0,00378157	
	1,27281181	0,07281181	0,00530156	0,00368164	
	1,32065979	-0,27934021	0,07803095	0,03048084	
	1,38328627	-0,31671373	0,10030759	0,03470851	
	1,44847556	-0,25152444	0,06326454	0,02189085	
	1,51238636	-0,08761364	0,00767615	0,0029985	
	1,57145978	0,37145978	0,13798237	0,09582109	
	1,61512419	-0,08487581	0,0072039	0,0024927	
	1,67610099	-0,32389901	0,10491057	0,02622764	
	1,74660117	-0,35339883	0,12489074	0,02831989	
	1,81929081	-0,18070919	0,03265581	0,00816395	
	1,8873386	0,1873386	0,03509575	0,01214386	
	1,9443327	-0,0556673	0,00309885	0,00077471	
	2,01044937	-0,28955063	0,08383957	0,01584869	
	2,08530979	-0,61469021	0,37784405	0,05183046	
	2,17169513	0,07169513	0,00514019	0,00116558	
	2,23784068	0,03784068	0,00143192	0,00029585	
	2,30621712	0,00621712	3,8653E-05	7,3067E-06	
	2,37675173	-0,92324827	0,85238737	0,07827249	
	2,47636259	-0,12363741	0,01528621	0,00226127	
	2,5536053	1,1536053	1,33080518	0,67898224	
	2,62691036	-0,67308964	0,45304967	0,04160236	
	2,7223058	-0,5776942	0,33373059	0,0306456	
	2,81623851	-0,08376149	0,00701599	0,00083424	
	2,89765011	-0,50234989	0,25235541	0,02183005	
	2,99182366	-0,30817634	0,09497265	0,00872109	
	3,08198443	-0,01801557	0,00032456	3,3773E-05	
	3,16562588	-0,53437412	0,2855557	0,02085871	
	3,26418949	-0,33581051	0,1127687	0,00870129	
	3,3588361	0,0588361	0,00346169	0,00031788	
	3,44456587	-0,45543413	0,20742024	0,0136371	
	3,54467737	-0,05532263	0,00306059	0,00023616	
	3,63598528	0,03598528	0,00129494	9,9918E-05	

Excel-Tabellenblatt 2 zur Berechnung von  $\lambda_k$

$\Delta\lambda$ [nm]	gerechnet un. Differenz	Differenz <sup>2</sup>	relative Fehle	Summe rel.F.
0,7902472	-0,0097528	9,5117E-05	0,00014862	1,41519238
0,83190257	-0,26809743	0,07187623	0,05940184	
0,88826236	-0,01173764	0,00013777	0,00017009	
0,93365084	0,03365084	0,00113238	0,001398	
0,9784399	0,0784399	0,00615282	0,00759607	
1,02267158	0,02267158	0,000514	0,000514	
1,07120899	-0,72879101	0,53113633	0,16393097	
1,15709605	-0,44290395	0,19616391	0,07662653	
1,23198933	-0,26801067	0,07182972	0,03192432	
1,30107975	0,30107975	0,09064902	0,09064902	
1,34658202	0,54658202	0,29875191	0,46679986	
1,38268094	0,18268094	0,03337233	0,02317523	
1,43634965	-0,46365035	0,21497165	0,05954893	
1,52021984	-0,27978016	0,07827694	0,02415955	
1,5985165	-0,4014835	0,161189	0,04029725	
1,68429429	-0,11570571	0,01338781	0,00413204	
1,76047763	-0,13952237	0,01946649	0,00539238	
1,83992162	-0,26007838	0,06764076	0,01533804	
1,92664494	-0,47335506	0,22406501	0,03890018	
2,02446175	-0,57553825	0,33124428	0,04900063	
2,12898383	-0,07101617	0,0050433	0,001042	
2,21633279	0,21633279	0,04679988	0,01169997	
2,29492604	-0,50507396	0,2550997	0,03253823	
2,40373213	0,20373213	0,04150678	0,00857578	
2,48827864	-0,11172136	0,01248166	0,0018464	
2,58719048	-0,71280952	0,50809741	0,04665725	
2,71125675	-0,68874325	0,47436726	0,04103523	
2,83746946	-0,06253054	0,00391007	0,00046493	
2,94391108	0,04391108	0,00192818	0,00022927	
3,04930391	-0,55069609	0,30326618	0,02340017	
3,17876054	-0,02123946	0,00045111	4,4054E-05	
3,29262559	0,39262559	0,15415485	0,01832995	
3,39488701	-0,30511299	0,09309394	0,00680014	
3,52414292	-0,17585708	0,03092571	0,002259	
3,65210706	0,55210706	0,30482221	0,03171927	
3,75837657	-0,24162343	0,05838188	0,00364887	
3,89429107	0,39429107	0,15546545	0,01269106	
4,01215318	0,41215318	0,16987024	0,01310727	

Excel-Tabellenblatt 3 zur Berechnung von  $\lambda_k$