

1 Auswertung

1.1 Bestimmung der Spektrometerkonstanten

Es wurden aus den Ausdrucken der Untergrund- und der Luftmessung die Werte für die Bestimmung der Spektrometerkonstanten entnommen. In Abbildung 1 wurden folgende Werte eingezeichnet ($amu = \text{atomare Masseneinheit}$):

U_{Ion} [V]	Masseneinheiten [amu]	Element bzw. Molekül
298	16	O_{16}
279	17	OH^*
263	18	H_2O^*
169	28	N_2^*
163	29	N_2
148	32	O_2
118	40	Ar_{40}

Die mit * gekennzeichneten Elemente bzw. Moleküle sind die markanten Linien im Untergrundspektrum. Durch die Punkte im Diagramm wurde eine Fitgerade gelegt. Die Geradengleichung lautet:

$$g(U_{Ion}) = m \frac{1}{U_{Ion}} + y \quad (1)$$

$$m = (4705 \pm 6) amuV \quad (2)$$

$$y = (0,16 \pm 0,03) amu \quad (3)$$

Die Steigung ist die Spektrometerkonstante c . Sie beträgt als

$$c = (4705 \pm 6) amuV$$

$$c = 4705 amuV \pm 0,12\%$$

1.2 Isotopenzusammensetzung von Neon und Argon

Die Berechnung der Isotopenzusammensetzung ist für Neon und Argon gleich, daher wird zuerst das Schema für die Berechnungen erstellt.

Aus den beiden Messungen einer Linie wird der Mittelwert und der Fehler des Mittelwerts berechnet.

$$\bar{x} = \frac{1}{2}(x_1 + x_2) \quad (4)$$

$$\Delta \bar{x} = \frac{1}{2} \sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta x_2^2} \quad (5)$$

Es wird die Höhe S des Gesamtpeaks unter Berücksichtigung der Verstärkung bestimmt.

$$s = \bar{x} + \bar{y} + \bar{z} \quad (6)$$

$$\Delta s = \sqrt{\Delta \bar{x}^2 + \Delta \bar{y}^2 + \Delta \bar{z}^2} \quad (7)$$

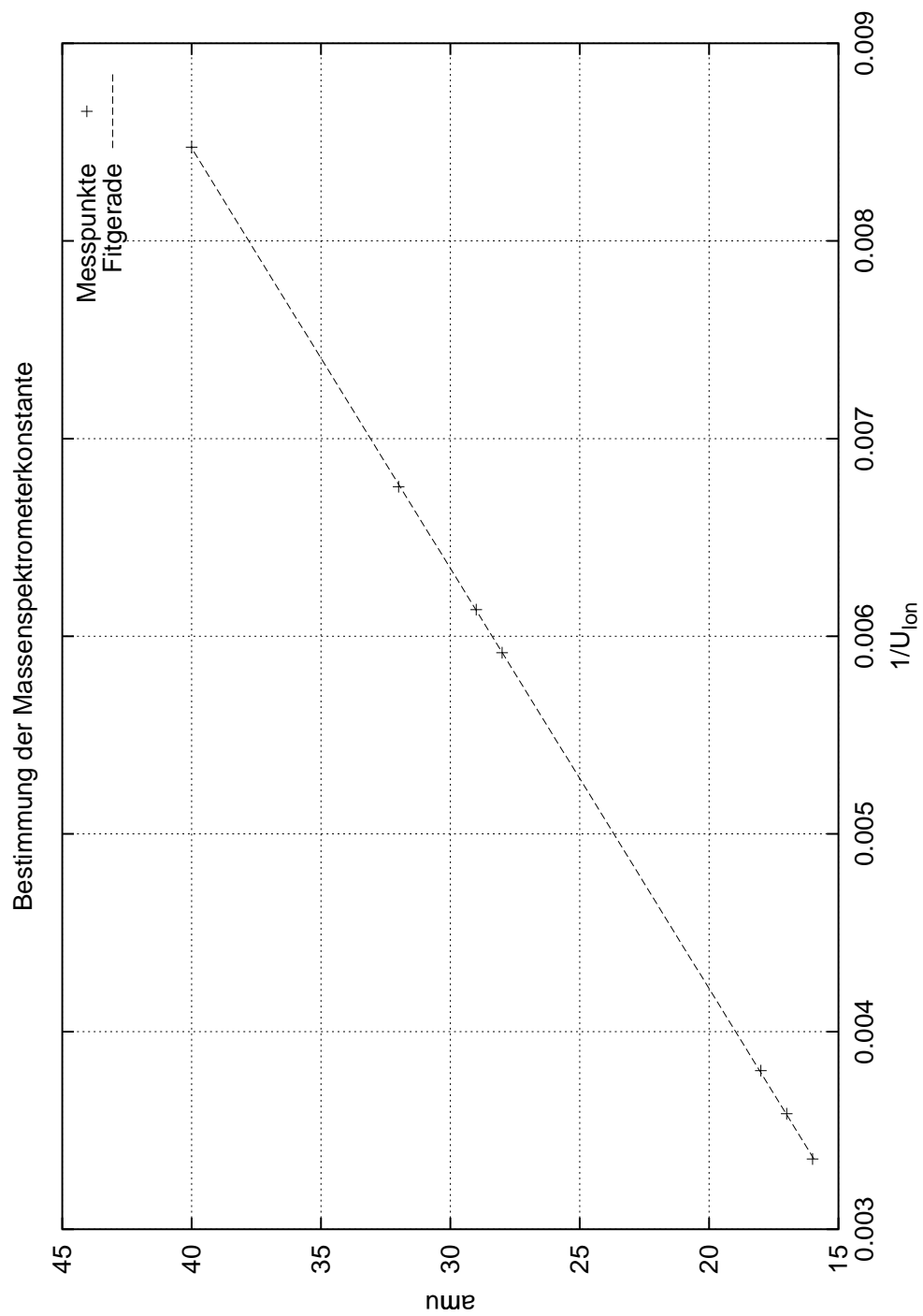


Abbildung 1:

Bestimmung des Anteiles der einzelnen Linien am Gesamtpeak.

$$a_1 = \frac{\bar{a}_1}{s} = \frac{\bar{a}_1}{\bar{a}_1 + \bar{a}_2 + \bar{a}_3} \quad (8)$$

$$\Delta a_1 = \frac{1}{s^2} \sqrt{(\bar{a}_2 + \bar{a}_3)^2 (\Delta \bar{a}_1)^2 + \bar{a}_1^2 (\Delta \bar{a}_2)^2 + \bar{a}_1^2 (\Delta \bar{a}_3)^2} \quad (9)$$

Für die anderen Anteile genauso. Diese Werte werden noch korrigiert um den Effekt der Massenfraktionierung zu beseitigen.

$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{a_1}{a_2} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \quad (10)$$

$$\Delta \frac{P_1}{P_2} = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \sqrt{\left(\frac{\Delta a_1}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{a_1 \Delta a_2}{a_2^2}\right)^2} \quad (11)$$

$$\frac{P_0}{P_2} = \frac{a_0}{a_2} \sqrt{\frac{m_2}{m_0}} \quad (12)$$

$$\Delta \frac{P_0}{P_2} = \sqrt{\frac{m_2}{m_0}} \sqrt{\left(\frac{\Delta a_0}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{a_0 \Delta a_2}{a_2^2}\right)^2} \quad (13)$$

$$(14)$$

Man kennt die Summe der beiden Anteile und das Verhältnis, woraus dann die richtige Zusammensetzung berechnet werden kann.

$$P_0 + P_1 + P_2 = 1 \quad (15)$$

$$\Rightarrow P_2 = \frac{1}{\frac{P_0}{P_2} + \frac{P_1}{P_2} + 1} \quad (16)$$

$$\Delta P_2 = \sqrt{\frac{\left(\Delta \frac{P_1}{P_2}\right)^2 + \left(\Delta \frac{P_0}{P_2}\right)^2}{\left(\frac{P_0}{P_2} + \frac{P_1}{P_2} + 1\right)^4}} \quad (17)$$

1.2.1 Neon

Aus den beiden Ausdrücken wurden folgende Werte bestimmt:

	Ne_{20}	Ne_{21}	Ne_{22}
Ausdruck 1[cm]	$8,3 \pm 0,2$	$0,3 \pm 0,2$	$8,1 \pm 0,2$
Ausdruck 2[cm]	$7,6 \pm 0,2$	$0,4 \pm 0,2$	$8,8 \pm 0,2$
Verstärkung 1	1	0,1	0,1
Verstärkung 2	1	0,1	0,1
Mittelwert[cm]	$7,95 \pm 0,14$	$0,35 \pm 0,14$	$8,45 \pm 0,14$
Mittelwert mit gleicher Verstärkung	$7,95 \pm 0,14$	$0,035 \pm 0,014$	$0,845 \pm 0,014$
Anteil[%]	$90,45 \pm 0,31$	$0,39 \pm 0,14$	$9,17 \pm 0,28$
Literaturwerte[%]	90,51	0,27	9,22

1.2.2 Argon

Aus den beiden Ausdrücken wurden folgende Werte bestimmt:

	Ar_{36}	Ar_{38}	Ar_{40}
Ausdruck 1[cm]	$6,7 \pm 0,2$	$1,3 \pm 0,2$	$19,3 \pm 0,3$
Ausdruck 2[cm]	$6,2 \pm 0,2$	$1,2 \pm 0,2$	$18,0 \pm 0,5$
Verstärkung 1	0,1	0,1	10
Verstärkung 2	0,1	0,1	10
Mittelwert[cm]	$6,5 \pm 0,14$	$1,3 \pm 0,14$	$18,7 \pm 0,29$
Mittelwert mit gleicher Verstärkung	$0,065 \pm 0,0014$	$0,013 \pm 0,0014$	$18,7 \pm 0,29$
Anteil[%]	$0,365 \pm 0,012$	$0,071 \pm 0,008$	$99,564 \pm 0,015$
Literaturwerte[%]	0,337	0,063	99,600

1.3 Verhältnis von Neon und Argon

Zur Vereinfachung der Berechnung wird die Masse für alle Peaks bei Neon auf 20amu und bei Argon auf 40amu gesetzt, da bei diesen Massen der bestimmte Peak des Isotops ist. Die einzelnen Peaks (s. 1.2.1 und 1.2.2) der Isotope werden zusammenaddiert. Der Fehler durch diese Vereinfachung ist klein gegen die Messfehler. Es wird die Massenfraktionierung berücksichtigt (s. 1.2).

$$Peak = \sum Einzelpeaks \quad (18)$$

$$\Delta Peak = \sqrt{\sum \Delta Einzelpeaks^2} \quad (19)$$

	Argon	Neon
Peak	$18,778 \pm 0,290$	$8,83 \pm 0,14$
Verstärkung	10	1
Peak mit gleicher Verstärkung	$18,778 \pm 0,290$	$0,883 \pm 0,014$
Korrekturfaktor	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{0,35}$
Partialdruckempfindlichkeit		
koor. Peak	$3,756 \pm 0,058$	$2,523 \pm 0,040$
Anteil[%]	$51,283 \pm 0,553$	$48,717 \pm 0,553$

1.4 Bestimmung der Magnetfeldstärke

Die Stärke des Magnetfeldes wird mit Hilfe der Ne_{20} und Ar_{40} bestimmt. Sie kann auch über die Spektrometerkonstante bestimmt werden.

Es besteht folgender Zusammenhang zwischen der Magnetfeldstärke, Masse und U_{Ion} :

$$B = \frac{1}{r} \sqrt{\frac{2U_{Ion}m}{e}} \quad (20)$$

$$\Delta B = \frac{1}{r} \sqrt{\frac{2m}{eU_{Ion}}} \Delta U_{Ion} \quad (21)$$

$$r = 5,08cm, \text{ Skript} \quad (22)$$

$$e = 1,602177 \cdot 10^{-19}C \quad (23)$$

$$amu = 1,660540 \cdot 10^{-27}kg \quad (24)$$

Bei Ne_{20} ist $U_{Ion} = (237 \pm 1)V$ und bei Ne_{40} ist $U_{Ion} = (118 \pm 1)V$, daraus erhält man:

$$B_{Ne} = (0,1951 \pm 0,0004)Tesla$$

$$= 0,1951Tesla \pm 0,2\%$$

$$B_{Ar} = (0,1947 \pm 0,0008)Tesla$$

$$= 0,1947Tesla \pm 0,4\%$$

Mittelwert der Messungen

$$B = (0,1949 \pm 0,0004)Tesla$$

$$= 0,1949Tesla \pm 0,2\%$$

1.5 Auftrittspotentiale für Argon und Neon

Aus den Abbildungen 2 und 3 wurden folgende Auftrittspotentiale bestimmt:

$$Ne \rightarrow Ne^+ : 22V \pm 1V$$

$$: 22V \pm 4,5\%$$

$$Ar \rightarrow Ar^+ : 14,5V \pm 2V$$

$$: 14,5V \pm 13,8\%$$

$$Ar \rightarrow Ar^{++} : 48V \pm 1,5V$$

$$: 48V \pm 3,1\%$$

Es wird eine $U_{EB} = 40V$ verwendet bei der Neon und Argon Messung um zu vermeiden, dass das Argon (insbesondere Ar_{40}) zweifach ionisiert wird und dann die Messungen des Ne_{20} verfälscht, da diese dann ein $M/n = 20$ hätten und somit im Spektrograph dieselbe Linie hätten.

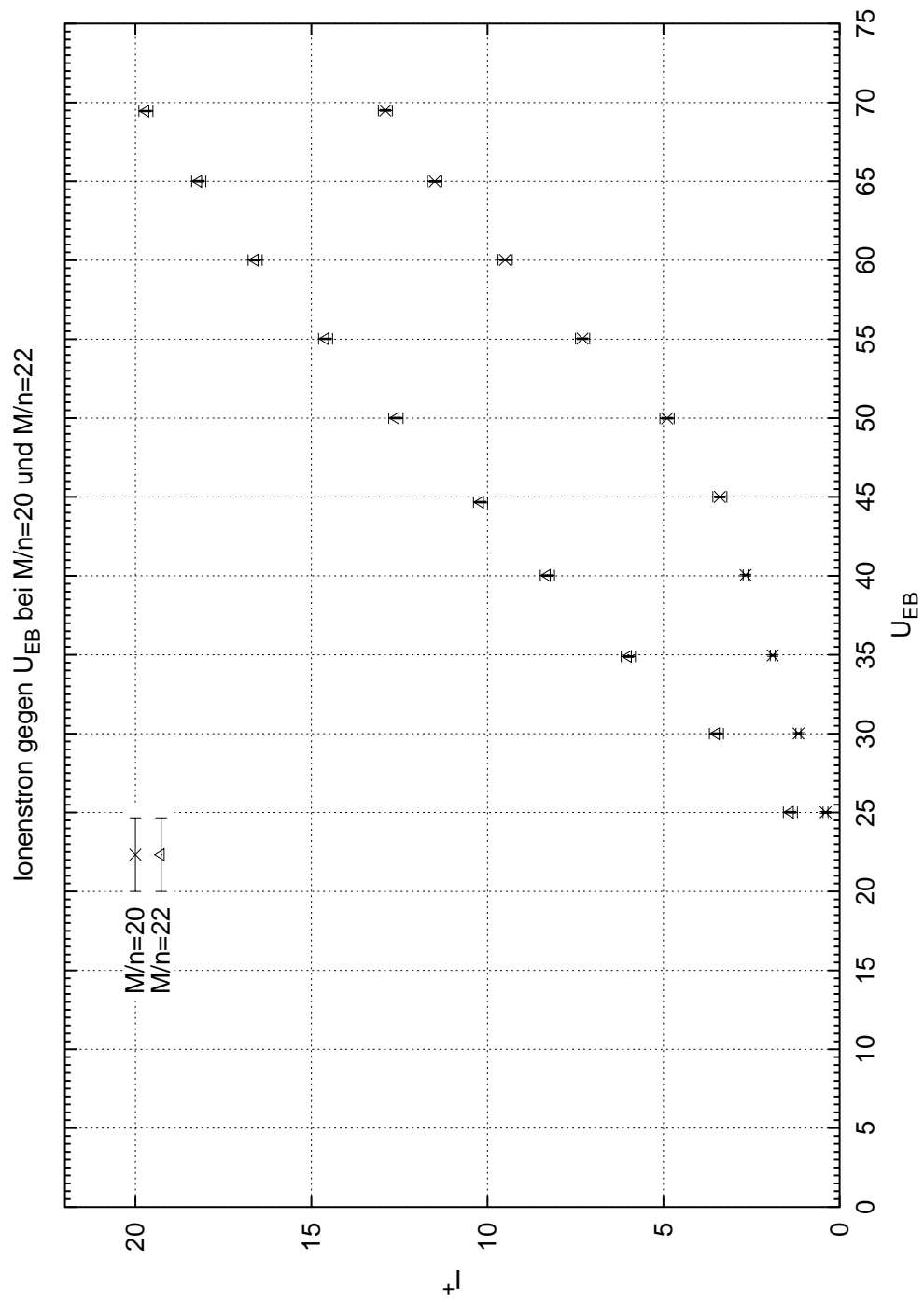


Abbildung 2:

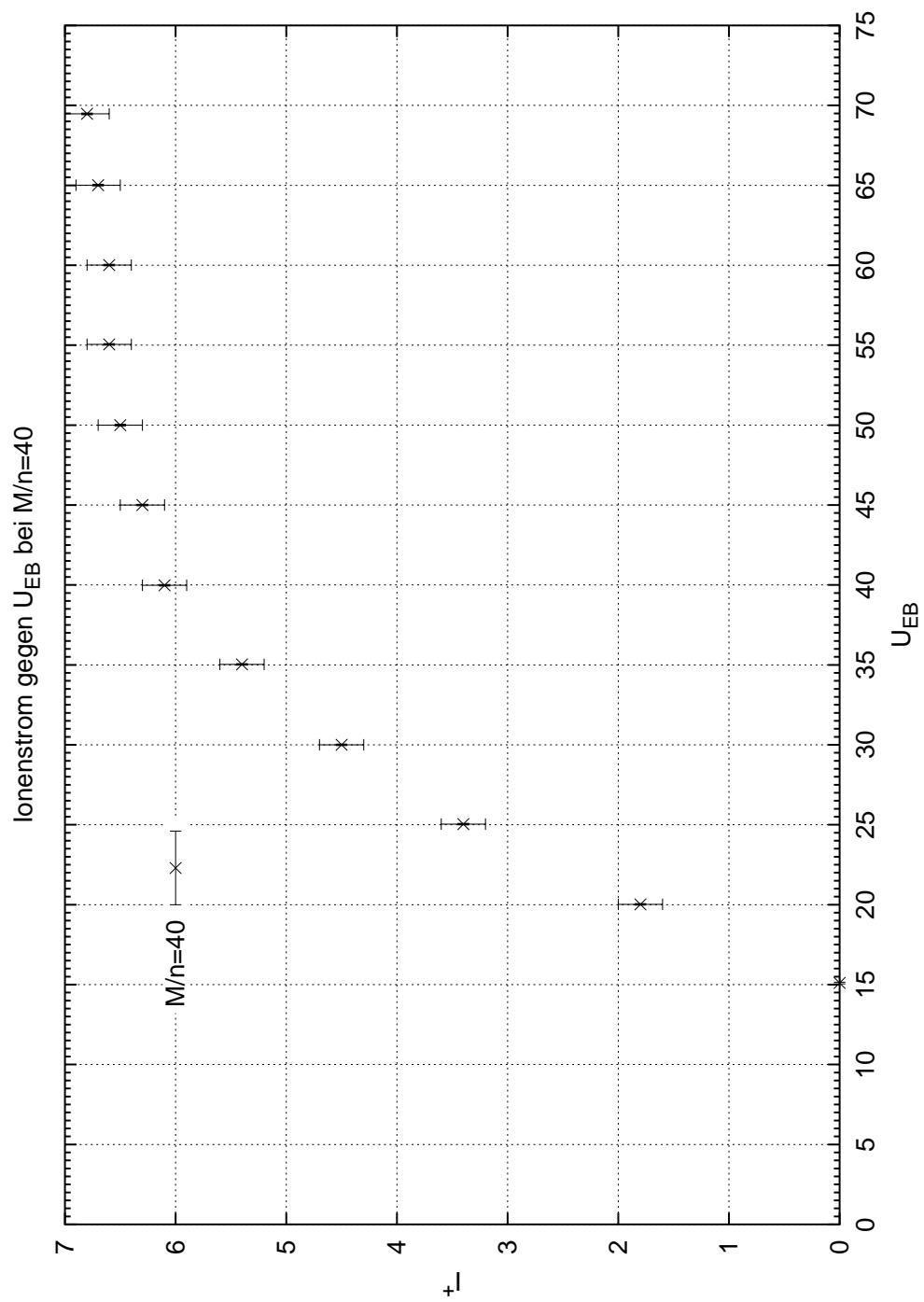


Abbildung 3:

1.6 Liniendeutung bei der Luftmessung

Interpretation der markanten Linien im Spektrum:

U_{Ion} [V]	Masseneinheiten [amu]	Element bzw. Molekül
338	14	N_{14}
295	16	O_{16}
279	17	OH^-
263	18	H_2O
169	28	N_2
163	29	$N_2 : N_{14}N_{15}$
158	30	NO
148	32	O_2
118	40	Ar

1.7 Isotopenzusammensetzung

Die Fehler wurden nach dem oben beschriebenen Verfahren bestimmt, wobei berücksichtigt wurde, dass die Summe und die einzelnen Werte in Beziehung stehen (s. 1.2) und ich es für überflüssig halte, diese Formeln in ihrer ganzen Länge hinzuschreiben.

1.7.1 Stickstoff

Aus den Ausdrücken wurden folgende Werte entnommen und ihr Mittelwert bestimmt:

	$N_{14}N_{14}$	$N_{14}N_{15}$
Ausdruck 1 [cm]	$7,3 \pm 0,2$	$6,9 \pm 0,2$
Ausdruck 2 [cm]	$7,4 \pm 0,2$	$7,0 \pm 0,2$
Mittelwert [cm]	$7,4 \pm 0,14$	$7,0 \pm 0,14$
Verstärkung	10	0,1
korr. Mittelwert	740 ± 14	$7,0 \pm 0,14$

Die Linie bei der $N_{15}N_{15}$ ist viel zu stark und wird von einer anderen Linie überlagert, wahrscheinlich $N_{14}O_{16}$, daher wird sie nicht beachtet. Die Massenfraktionierung wird hier berücksichtigt. Die Wahrscheinlichkeiten für die Zusammensetzungen sind:

$$I_{28} = \text{korr. Peakhöhe der Masse 28amu} \quad (25)$$

$$I_{29} = \text{korr. Peakhöhe der Masse 29amu} \quad (26)$$

$$a = \text{Wahrscheinlichkeit für } {}^{14}N \quad (27)$$

$$b = \text{Wahrscheinlichkeit für } {}^{15}N \quad (28)$$

$$K = \text{Normierungsfaktor} \quad (29)$$

$$a^2 = KI_{28} = K(740,1 \pm 13,9) \quad (30)$$

$$2ab = KI_{29} = K(6,88 \pm 0,23) \quad (31)$$

$$a + b = 1 \quad (32)$$

Die Isotopenverhältnisse sind also:

$$a = \frac{2I_{28}}{I_{29}} \frac{1}{1 + \frac{2I_{28}}{I_{29}}} \quad (33)$$

$$K = \frac{a^2}{I_{28}} \quad (34)$$

$$b = 1 - \frac{2I_{28}}{I_{29}} \frac{1}{1 + \frac{2I_{28}}{I_{29}}} \quad (35)$$

Die Fehlerrechnung zieht sich hier stark in die Länge da $K = K(I_{28}, I_{29})$ ist und man daher in der Fehlerfortpflanzung aufpassen muß, wenn man nach I_{xx} differenziert. Nach einsetzen der Werte:

$$a = {}^{14}N = 99,537\% \pm 0,925\%$$

$$b = {}^{15}N = 0,463\% \pm 0,017\%$$

$$K = 0,00133 \pm 0,00002$$

Der Literaturwert für ${}^{14}N$ ist 99,63% und stimmt mit dem Messwert überein. Der Literaturwert für ${}^{15}N$ ist 0,37% und stimmt mit dem Messwert nicht überein.

1.7.2 Sauerstoff

Aus den Ausdrucken wurden folgende Werte entnommen und ihr Mittelwert bestimmt. Die Massenfraktionierung wird berücksichtigt. Der Peak der ${}^{18}O^{18}O$ entspricht wird nicht berücksichtigt, da diese Linie mit ${}^{36}Ar$ zusammenfällt:

	$O_{16}O_{16}$	$O_{16}O_{17}$	$O_{16}O_{18}$ $O_{17}O_{17}$
Ausdruck 1[cm]	$1,4 \pm 0,2$	$0,3 \pm 0,2$	$0,7 \pm 0,2$
Ausdruck 2[cm]	$1,5 \pm 0,2$	$0,2 \pm 0,2$	$0,6 \pm 0,2$
Mittelwert [cm]	$1,5 \pm 0,14$	$0,3 \pm 0,14$	$0,7 \pm 0,14$
Verstärkung	10	0,1	0,1
korr. Mittelwert	150 ± 14	$0,3 \pm 0,14$	$0,7 \pm 0,14$

Die Wahrscheinlichkeiten für die Zusammensetzungen sind:

$$a = \text{Wahrscheinlichkeit für } {}^{16}O \quad (36)$$

$$b = \text{Wahrscheinlichkeit für } {}^{17}O \quad (37)$$

$$c = \text{Wahrscheinlichkeit für } {}^{18}O \quad (38)$$

$$I_{32} = \text{korr. Peakhöhe der Masse 32amu} \quad (39)$$

$$I_{33} = \text{korr. Peakhöhe der Masse 33amu} \quad (40)$$

$$I_{34} = \text{korr. Peakhöhe der Masse 34amu} \quad (41)$$

$$K = \text{Normierungsfaktor} \quad (42)$$

$$a^2 = KI_{32} = K(150,0 \pm 13,9) \quad (43)$$

$$2ab = KI_{33} = K((0,295 \pm 0,142) \quad (44)$$

$$2ac + b^2 = KI_{34} = K(0,679 \pm 0,162) \quad (45)$$

$$a + b + c = 1 \quad (46)$$

Die Isotopenverhältnisse sind also:

$$K = \frac{64I_{32}^3}{(8I_{32}^2 + 4I_{32}I_{33} - I_{33}^2 + 4I_{32}I_{34})^2} \quad (47)$$

$$a = \sqrt{KI_{32}} \quad (48)$$

$$b = \sqrt{\frac{K}{I_{32}} \frac{I_{33}}{2}} \quad (49)$$

$$c = 1 - b - a = 1 - \sqrt{KI_{32}} - \sqrt{\frac{K}{I_{32}} \frac{I_{33}}{2}} \quad (50)$$

Die Fehlerrechnung zieht sich hier stark in die Länge da $K = K(I_{32}, I_{33}, I_{34})$ ist und man daher in der Fehlerfortpflanzung aufpassen muß, wenn man nach I_{xx} differenziert. Nach einsetzen der Werte:

$$a = {}^{16}O = 99,68\% \pm 4,59\%$$

$$b = {}^{17}O = 0,098\% \pm 0,048\%$$

$$c = {}^{18}O = 0,226\% \pm 0,056\%$$

$$K = 0,0066 \pm 0,0006$$

Der Literaturwert für O_{16} ist 99,762% und stimmt mit dem Messwert überein. Der Literaturwert für O_{17} ist 0,036% und stimmt mit dem Messwert nicht überein. Der Literaturwert für O_{18} ist 0,200% und stimmt mit dem Messwert überein.

1.8 Zusammensetzung der Luft

Es werden für die Berechnung die gleichen Vereinfachungen gemacht wie bei 1.3. Es werden nur die Moleküllinien verwendet von Sauerstoff und Stickstoff, da von den Atomlinien kein vollständiger Messsatz vorhanden ist.

Aus den vorher gemachten Betrachtungen können sofort die Summen der Moleküllinie bestimmt werden. Die Linie der Argonlinien wird aus dem Diagramm entnommen.

	Sauerstoff	Stickstoff	Argon
Summe	151 ± 10	747 ± 10	$17,2 \pm 2,8$
Korrektur	$\frac{1}{1,7}$	$\frac{1}{2,5}$	$\frac{1}{5}$
Partialdruckempfindlichkeit			
korr .Summe	88 ± 6	299 ± 4	$3,44 \pm 0,06$

Es wird jetzt genauso verfahren wie in dem vorangegangenen Berechnung, wobei das Argon bei der Massenfraktionierung nicht berücksichtigt wird. Man erhält folgende Ergebnisse:

$$\begin{aligned}
N_2 &= 78,2\% \pm 1,6\% \\
O_2 &= 21,8\% \pm 1,6\% \\
Ar &= 0,88\% \pm 0,02\%
\end{aligned}$$

Auf der Webseite

<http://www.herasum.de/luft/luftmessnetz/erklarungen/zusammensetzung/zusammensetzung.html>

wurden folgende Werte für die Luftzusammensetzung gefunden:

$$\begin{aligned}
N_{2lit} &= 78,08\% \\
O_{2lit} &= 20,95\% \\
Ar_{lit} &= 0,93\%
\end{aligned}$$

Die gemessenen Werte und diese stimmen überein.

1.9 Isotopenzusammensetzung von Kohlenstoff

Es werden für die Auswertung die Linien für $45amu$, $46amu$ und $47amu$ berücksichtigt. Diese Linien entsprechen folgende Moleküle:

	C_{12}	C_{13}	O_{16}	O_{18}	H_1	Wahrscheinlichkeit
$45amu$	2	0	1	0	5	$W_5 a_1^2 c$
$46amu$	2	0	1	0	6	$W_6 a_1^2 c$
$46amu$	1	1	1	0	5	$2W_5 a_1 a_2 c$
$47amu$	2	0	0	1	5	$W_5 a_1^2 d$
$47amu$	1	1	1	0	6	$2W_6 a_1 a_2 c$
$47amu$	0	2	1	0	5	$W_5 a_2^2 c$

Erklärung der Abkürzungen:

$$a_1 = C_{12}, a_2 = C_{13}, c = O_{16}, d = O_{18} \quad (51)$$

$$W_5 = \text{Wahrscheinlichkeit von 5 H's im Molekül} \quad (52)$$

$$W_6 = \text{Wahrscheinlichkeit von 6 H's im Molekül} \quad (53)$$

$$(54)$$

Alle anderen Möglichkeiten werden nicht berücksichtigt, da sie als zu unwahrscheinlich angenommen werden. Es werden auch nicht die Isotope ^{17}O und ^2H berücksichtigt, da ihr Vorkommen sehr gering ist ($\Rightarrow {}^1\text{H} \approx 100\%, {}^{17}\text{O} \approx 0\%$). Die Massenfraktionierung wird vernachlässigt. Diese würde bewirken, dass das Verhältnis von schweren Moleküle zu leichteren Moleküle zu Gunsten der leichteren verschoben würde. Der Fehler der mit dieser Vereinfachung gemacht wird abgeschätzt auf $3\% \approx 1 - \sqrt{47/45}$.

Man kann jetzt ein Gleichungssystem aufstellen:

$$a_1 + a_2 = 1 \quad (55)$$

$$W_5 a_1^2 c = l_1 \quad (56)$$

$$W_6 a_1^2 c + 2W_5 a_1 a_2 c = l_2 \quad (57)$$

$$W_5 a_1^2 d + 2W_6 a_1 a_2 c + W_5 a_2^2 c = l_3 \quad (58)$$

$$(59)$$

l_i sind die Anteile der 3 Peaks bei den 3 Massen. Aus dem Ausdruck wurde abgelesen:

	$45\text{amu} \hat{=} 105V$	$46\text{amu} \hat{=} 102V$	$47\text{amu} \hat{=} 100V$
Ablesewert [cm]	$7,2 \pm 0,2$	$3,8 \pm 0,2$	$3,5 \pm 0,2$
Verstärkung	30	30	1
korr. Werte x	216 ± 6	114 ± 6	$3,5 \pm 0,2$

Ab hier werden die Messfehler nicht mehr berücksichtigt, d. h. man macht einen zusätzlichen Fehler mit ungefähr $5\% \approx 0,2/3,5$. Die Summe ist damit:

$$S = 216 + 114 + 3,5 = 333,5$$

Die Anteile sind also:

$$l_1 = \frac{\text{Peak}_{45\text{amu}}}{S} = 64,77\%$$

$$l_2 = \frac{\text{Peak}_{46\text{amu}}}{S} = 34,18\%$$

$$l_3 = \frac{\text{Peak}_{47\text{amu}}}{S} = 1,05\%$$

Für den Sauerstoff wurden die Literaturwerte genommen, also $O_{16} = 99,762\%$ und $O_{18} = 0,200\%$. Mit Hilfe eines Computers wurde das Gleichungssystem gelöst mit folgenden Ergebnissen:

$$C_{12} = 98,6\%$$

$$C_{13} = 1,4\%$$

$$W_5 = 66\%$$

$$W_6 = 33\%$$

Die Literaturwerte sind $C_{12} = 98, 20\%$ und $C_{13} = 1, 10\%$. Diese Werte stimmen mit den Messwerten überein unter Berücksichtigung der Vereinfachungen. Der Fehler der durch die Vereinfachungen entsteht kann man also auf $5\% + 3\% + x = 10\%$ abschätzen, wobei das x steht für alle nicht explizit aufgelisteten Fehler (z. B. Fehler durch nicht Berücksichtigung aller Kombinationen), wobei ich meine mit 2% dürften diese wirklich ausreichend bemessen sein (Die Fehlerangaben sind hier relative Fehler und keine absoluten Fehler. Man muss aufpassen, da alle Ergebnisse in Prozent angegeben sind und ihre Fehler auch, diese sind dann aber absolute Fehler und keine relative Fehler).