

Rotations-Schwingungs-Spektren

Grundlagen

Rotation

Der starre Rotator

Zur Beschreibung der Rotation geht man zunächst vom Modell des starren Rotators aus. Dies ist das einfachste Modell eines rotierenden zweiatomigen Moleküls. Man stellt sich zwei starr in konstantem Abstand miteinander verbundene Atome vor, die um den gemeinsamen Schwerpunkt rotieren.

Für die Rotationsenergie gilt:

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \mu \cdot r^2 \omega^2 = \frac{1}{2} I \cdot \omega^2 = \frac{L^2}{2I}$$

μ : reduzierte Masse,
 r : Teilchenabstand,
 ω : Winkelgeschwindigkeit,
 I : Trägheitsmoment,
 L : Drehimpuls

Aus quantenmechanischen Betrachtungen ergibt sich für den Drehimpuls:

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{J(J+1)}$$

J : Drehimpulsquantenzahl

Damit ergibt sich für die Energie-Eigenwerte des starren Rotators:

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

Den in der Spektroskopie üblichen Termwert (in cm^{-1}) erhält man durch Division mit hc :

$$F(J) = \frac{E_{\text{rot}}}{hc} = B \cdot J(J+1)$$

B nennt man Rotationskonstante, für sie gilt:

$$B = \frac{h}{8 \cdot \pi^2 \cdot c \cdot I}$$

Für Übergänge zwischen Rotations-Niveaus gilt die Auswahlregel $\Delta J = \pm 1$. Die Linien im Rotationsspektrum haben demnach konstante Abstände von $2B$ und es ergibt sich für die Wellenzahl der Rotationslinien:

$$\tilde{\nu}_{J \rightarrow J+1} = 2B(J+1)$$

Der nicht-starre Rotator

Bei genauerer Betrachtung der Spektren erkennt man allerdings, dass die Absorptionslinien nicht exakt äquidistant sind. Die Abstände werden mit zunehmender Quantenzahl J kleiner. Um dieser Tatsache Rechnung zu tragen, muss das Modell des starren Rotators zum nicht-starren Rotator erweitert werden.

Die Abstände der Kerne im Molekül nehmen mit ansteigender Rotationsquantenzahl J aufgrund der Zentrifugaldehnung zu. Damit geht eine Vergrößerung des Trägheitsmomentes einher. Man führt einen Korrekturterm $DJ^2(J+1)^2$ ein:

$$F(J) = \frac{E_{\text{rot}}}{hc} = B \cdot J(J+1) - DJ^2(J+1)^2$$

mit der Zentrifugaldehnungskonstante D :

$$D = \frac{\hbar^3}{4\pi \cdot k \cdot I^2 \cdot r^2 \cdot c}$$

k : Federkonstante

r : Gleichgewichtsabstand

Aus der Messung von D lässt sich die Federkonstante k bestimmen, die ein Maß für die Bindungsstärke darstellt. Für kleine Rotationsquantenzahlen J ist der Korrekturterm vernachlässigbar, weil $D \ll B$.

Bei noch genauerer Betrachtung sind die Rotationskonstante B und die Zentrifugaldehnungskonstante D nicht konstant, sondern hängen in erster Näherung linear von der Schwingungsquantenzahl v ab:

$$B_v = B_e - \alpha \left(v + \frac{1}{2} \right)$$

$$D_v = D_e - \beta \left(v + \frac{1}{2} \right)$$

B_e ist die Rotationskonstante im hypothetischen schwingungslosen Zustand, B_v dementsprechend diejenige im Schwingungszustand v . α ist eine molekülspezifische positive Größe, für die $\alpha \ll B_e$ gilt. Die molekülspezifische Größe β kann in den meisten Fällen vernachlässigt werden, so dass $D_v = D_e$ gilt.

Von dieser Näherung wird in der Auswertung bei der Bestimmung von D_e Gebrauch gemacht werden.

Schwingungen

Der harmonische Oszillator

Das einfachste Modell zur Beschreibung von Schwingungen ist der harmonische Oszillator. Der harmonische Oszillator hat die makroskopische Betrachtung zweier durch eine elastische Feder verbundenen Massen (zweiatomiges Molekül) zur Grundlage. Seine potentielle Energie beträgt:

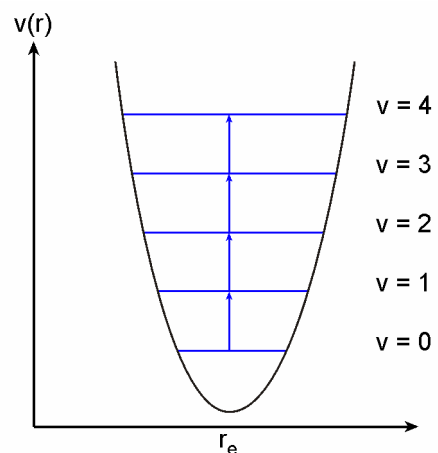
$$V(r) = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r - r_e)^2$$

r_e : Gleichgewichtsabstand
 k : Federkonstante

Für die **Eigenfrequenz ν_0** folgt nach der klassischen Mechanik:

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

Aus der Formel ist ersichtlich, dass die Schwingungsfrequenz ν umso höher liegt, je stärker die Bindung ist (desto größer ist auch die Kraftkonstante k) und je kleiner die Massen der beteiligten Atome sind (desto kleiner ist die reduzierte Masse μ).



Die Lösung der Schrödingergleichung liefert für die Energie-Eigenwerte E_v des harmonischen Oszillators:

$$E_v = h \cdot \nu_0 \cdot \left(v + \frac{1}{2} \right)$$

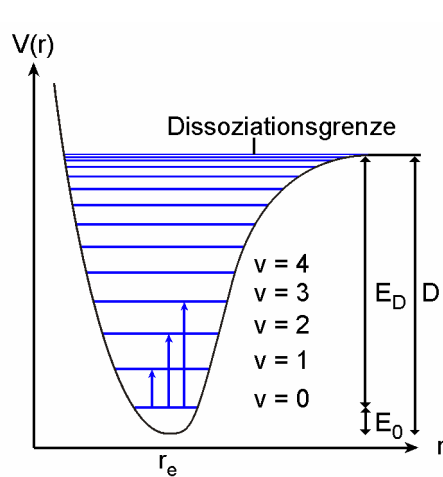
Schwingungsquantenzahl $v = 0, 1, 2, \dots$

Die Schwingungsquantenzahl v beschreibt die Energieniveaus der Schwingung, welche stets den gleichen Abstand $h \cdot \nu_{\text{vib}}$ besitzen. Aufgrund der Auswahlregel $\Delta v = \pm 1$ sind nur Übergänge zwischen benachbarten, äquidistanten Energieniveaus erlaubt. Das würde jedoch bedeuten, dass nur bei einer einzigen Frequenz absorbiert werden würde. Kombinations- und Oberschwingungen sind ebenfalls nicht zu erklären.

Des Weiteren berücksichtigt das Modell des harmonischen Oszillators keine Dissoziation des Moleküls, da die potentielle Energie bis ins unendliche ansteigt. Um diese Unzulänglichkeiten des Modells zu korrigieren, muss der harmonische Ansatz erweitert werden.

Der anharmonische Oszillator

Mit dem Modell des anharmonischen Oszillators lassen sich die oben genannten Phänomene berücksichtigen. Zunächst wird das Morse-Potential eingeführt:



$$V(r) = D \cdot \left(1 - e^{-a(r-r_e)}\right)^2$$

a: Morseparameter

D: Dissoziationsenergie

Damit ergibt sich das nebenstehende Diagramm. Die Anregung einer Schwingung führt dazu, dass das Molekül durch Absorption eines Lichtquants vom Schwingungszustand $v = n$ in einen höheren Zustand wie z.B. $v = n + 1$ übergeht. Die Energiedifferenz der Zustände entspricht dann aufgrund der Resonanzbedingung der Energie des Lichtquants.

Bei quantentheoretischer Behandlung findet man für die Energie-Eigenwerte des anharmonischen Oszillators die Näherung (die Reihenentwicklung wurde nach dem quadratischen Term abgebrochen):

$$E_v = h \cdot \nu_0 \left[\left(v + \frac{1}{2} \right) - \frac{h\nu_0}{4D} \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \right] \quad v = 0, 1, 2, \dots$$

Für die Schwingungsterme $G(v)$ gilt:

$$G(v) = \frac{E_v}{hc} = \tilde{\nu} \left(v + \frac{1}{2} \right) - x \cdot \tilde{\nu} \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

$$x = \frac{\hbar 2\pi \nu}{4D} = \text{Anharmonizitätskonstante}$$

Mit wachsendem v wird der Abstand benachbarter Schwingungsniveaus bis zum Erreichen der Dissoziationsgrenze immer kleiner. Die Auswahlregel lautet als Folge der Anharmonizität nun $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$.

Rotations-Schwingungs-Spektren

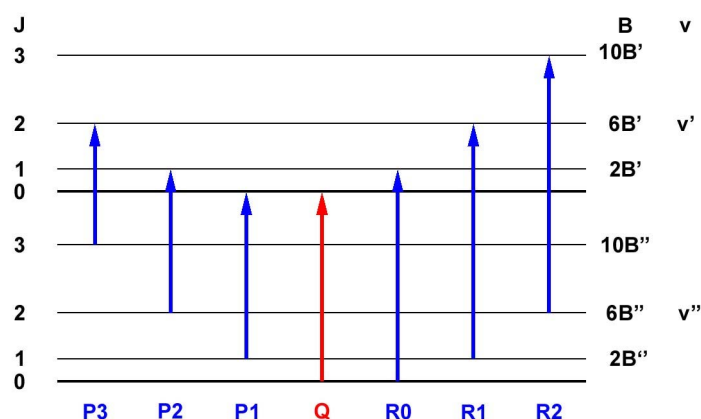
Aus der Kopplung der Schwingung und der Rotation resultiert der folgende Ausdruck für die Rotations-Schwingungs-Terme:

$$T(v, J) = G(v) + F(J) = \tilde{\nu} \left(v + \frac{1}{2} \right) - x \cdot \tilde{\nu} \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + B_v \cdot J(J+1) - D_v \cdot J^2(J+1)^2$$

und genauer:

$$T(v, J) = G(v) + F(J) = \tilde{\nu} \left(v + \frac{1}{2} \right) - x \cdot \tilde{\nu} \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + B \cdot J(J+1) - D \cdot J^2(J+1)^2 - \alpha \left(v + \frac{1}{2} \right) \cdot J(J+1) - \beta \left(v + \frac{1}{2} \right) J^2(J+1)^2$$

Das dargestellte Rotations-Schwingungs - Spektrum zeigt die Übergänge zwischen den beiden Schwingungszuständen $v''=0$ und $v'=1$ (Übergänge mit $\Delta v > 1$ haben sehr geringe Intensität, da bei Raumtemperatur die angeregten Schwingungsniveaus kaum besetzt sind):



$$\Delta T = T(v' = 1, J) - T(v'' = 0, J)$$

Die Auswahlregel ist $\Delta J = 0, \pm 1$. Für Moleküle ohne Drehimpulskomponente entlang der Kernverbindungsachse gilt $\Delta J = \pm 1$. Es treten daher zwei Zweige im Spektrum auf: P-Zweig („poor“, energieärmer) mit $\Delta J = -1$ und den Wellenzahlen $\tilde{\nu}_P$:

$$\tilde{\nu}_P = (v' - v'') \cdot \tilde{\nu} - \tilde{\nu}x \left[(v' - v'') \cdot (v' + v'' + 1) \right] - (B_{v'} + B_{v''}) \cdot J'' + (B_{v'} - B_{v''}) \cdot J''^2 + 4D \cdot J''^3$$

R-Zweig („rich“, energiereicher) mit $\Delta J = +1$ und den Wellenzahlen $\tilde{\nu}_R$:

$$\tilde{\nu}_R = (v' - v'') \cdot \tilde{\nu} - \tilde{\nu}x \left[(v' - v'') \cdot (v' + v'' + 1) \right] + (B_{v'} + B_{v''}) \cdot (J'' + 1) + (B_{v'} - B_{v''}) \cdot (J'' + 1)^2 - 4D \cdot (J'' + 1)^3$$

Die Intensität der Absorptionslinie ist proportional zur Übergangswahrscheinlichkeit und zur Besetzung des jeweiligen Ausgangszustandes. Die Boltzmann-Verteilung beschreibt die Besetzung der Rotationsniveaus im Gleichgewicht bei der Temperatur T mit folgender Gleichung:

$$\frac{N_J}{N_0} = \underbrace{(2J+1)}_{\text{Entartungsgrad der Rotation}} \underbrace{e^{\frac{-Bhc}{kT}J(J+1)}}_{\text{thermische Besetzung}}$$

Isotopie-Effekte

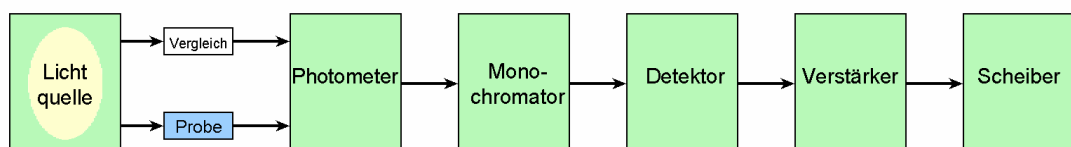
Die Feinaufspaltung der Spektren ist auf Isotopie-Effekte zurückzuführen. Die Rotationskonstante ist dem Trägheitsmoment und damit der reduzierten Masse umgekehrt proportional:

$$\frac{B_{37}}{B_{35}} = \frac{\mu_{35}}{\mu_{37}} = \frac{I_{35}}{I_{37}}$$

Moleküle mit schwereren Isotopen haben daher Rotationslinien mit geringeren Quantenenergien und kleinerem gegenseitigem Abstand. Aus den Linienintensitäten kann man die Isotopenhäufigkeit bestimmen.

Aufbau eines Infrarot-Spektrometers

Das häufig verwendete Doppelstrahl-IR-Spektrometer enthält eine Lichtquelle, die den gesamten zu untersuchenden Frequenzbereich emittiert. Dies ist beispielsweise ein weißglühender Nernst-Stift (Zirkoniumoxid mit verschiedenen seltenen Erden) oder ein Globar aus Siliciumcarbid (Brenntemperatur 1500 K).



Die kontinuierliche Strahlung wird in zwei Lichtbündel identischer Intensität aufgeteilt, von denen das eine durch die zu messende Probe geleitet wird, das andere durch eine Küvette mit dem reinen Lösungsmittel.

Im Photometer findet der optische Nullabgleich beider Lichtbündel statt. Der Monochromator (ein Prisma oder Beugungsgitter) zerlegt die resultierende Strahlung und leitet sie in den Detektor weiter. Dieser registriert die optischen Signale und wandelt sie in elektrische um. Die verstärkten Signale werden dann von einem Schreiber als Spektrum ausgegeben.

Sicherheit

Chlorwasserstoff	HCl	
	R 23	Giftig beim Einatmen
	R 35	Verursacht schwere Verätzungen
	S 9	Behälter an einem gut gelüfteten Ort aufbewahren
	S 26	Bei Berührung mit den Augen sofort gründlich mit Wasser abspülen und den Arzt konsultieren
	S 36/37	Bei der Arbeit geeignete Schutzhandschuhe und Schutzkleidung tragen
	S 39	Schutzbrille/Gesichtsschutz tragen
	S 45	Bei Unfall oder Unwohlsein sofort Arzt hinzuziehen (wenn möglich dieses Etikett vorzeigen)
	C	Ätzend

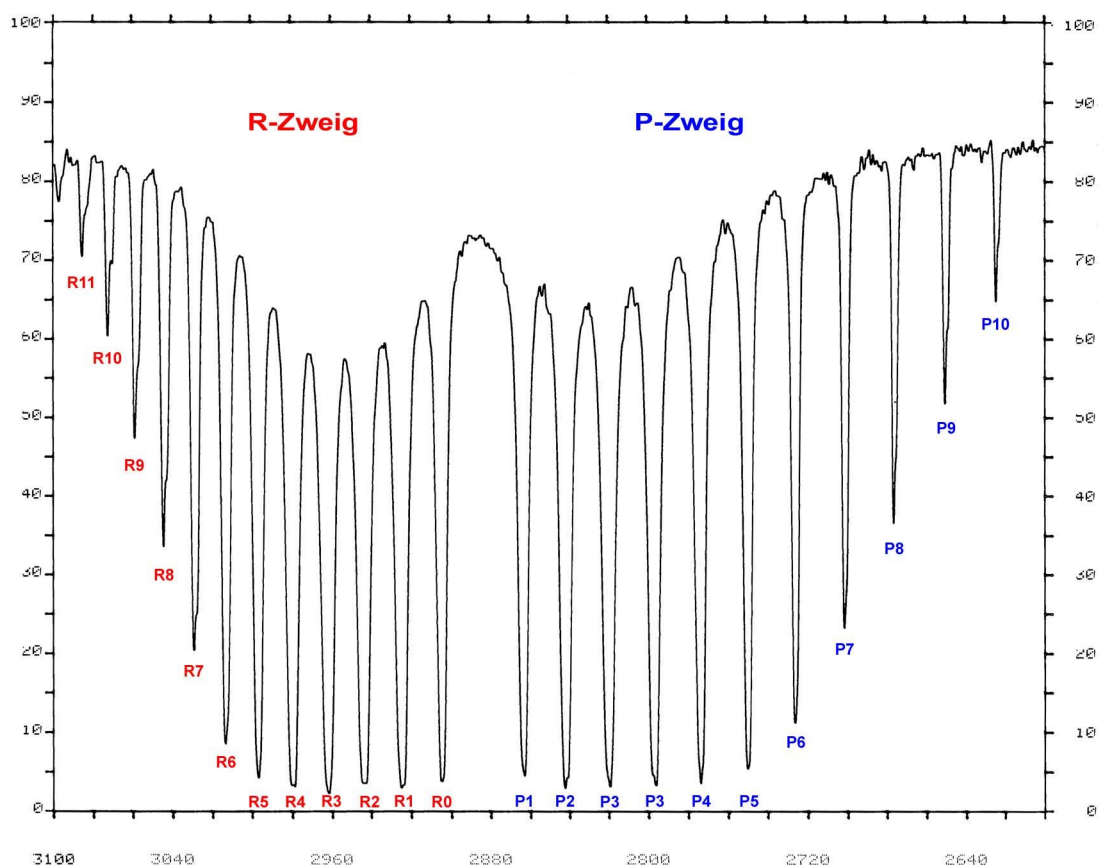
Durchführung

Eine Küvette wird mit Chlorwasserstoffgas gefüllt und in den Strahlengang eines IR-Spektrometers gebracht. Es wird ein Spektrum im Bereich von 3100 cm^{-1} bis 2600 cm^{-1} aufgenommen.

Messergebnisse

R-Zweig	$\tilde{\nu}$	T
	$\frac{1}{\text{cm}}$	%
R ₀	2905.4	3.48
R ₁	2925.2	2.66
R ₂	2944.6	3.26
R ₃	2962.0	1.98
R ₄	2979.0	2.83
R ₅	2996.8	3.95
R ₆	3013.6	8.27
R ₇	3029.6	20.17
R ₈	3044.6	33.28
R ₉	3059.0	47.07
R ₁₀	3072.6	60.05
R ₁₁	3085.4	70.12
R ₁₂	3097.2	77.12

P-Zweig	$\tilde{\nu}$	T
	$\frac{1}{\text{cm}}$	%
P ₁	2863.2	4.21
P ₂	2842.6	2.62
P ₃	2819.8	2.83
P ₄	2796.6	3.02
P ₅	2774.0	3.27
P ₆	2750.6	5.11
P ₇	2726.6	10.93
P ₈	2702.0	23.07
P ₉	2676.8	36.51
P ₁₀	2651.0	51.50



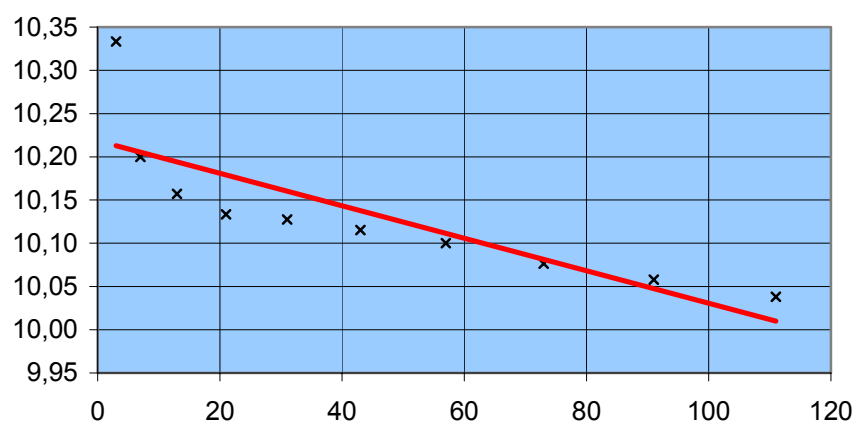
Auswertung**Berechnung der Rotationskonstanten**

Die Gleichung

$$\frac{R_J - P_J}{4(J + \frac{1}{2})} = B_{v'} - 2 \cdot D_e (J^2 + J + 1)$$

ergibt in der Auftragung von $y = \frac{R_J - P_J}{4(J + \frac{1}{2})}$ gegen $x = J^2 + J + 1$ eine Gerade, aus deren Steigung $-2 \cdot D_e$ die Zentrifugaldehnungskonstante D_e bestimmt werden kann. Der Ordinatenabschnitt entspricht der Rotationskonstanten $B_{v'}$.

J	$J^2 + J + 1$	$\frac{R_J - P_J}{4(J + \frac{1}{2})}$	$\frac{R_{J-1} - P_{J+1}}{4(J + \frac{1}{2})}$
		$\frac{1}{\text{cm}}$	$\frac{1}{\text{cm}}$
1	3	10.333	10.467
2	7	10.200	10.540
3	13	10.157	10.571
4	21	10.133	10.444
5	31	10.127	10.382
6	43	10.115	10.392
7	57	10.100	10.387
8	73	10.076	10.376
9	91	10.058	10.358
10	111	10.038	10.338
11	133	10.013	66.796



$$y = -0.0019 \cdot x + 10.218$$

Daraus ergeben sich die Werte:

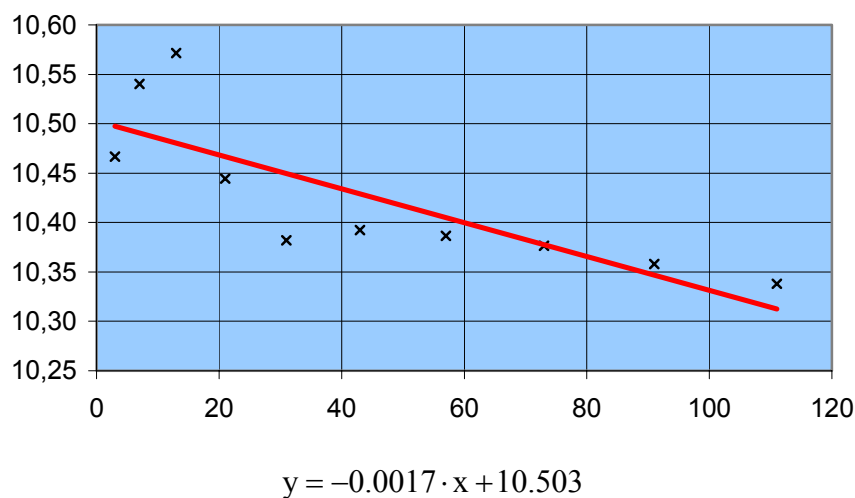
$$D_e = 9.5 \cdot 10^{-4} \frac{1}{\text{cm}}$$

$$B_{v'} = 10.218 \frac{1}{\text{cm}}$$

Die Gleichung

$$\frac{R_{J-1} - P_{J+1}}{4(J + \frac{1}{2})} = B_{v''} - 2 \cdot D_e (J^2 + J + 1)$$

ergibt in der Auftragung von $y = \frac{R_{J-1} - P_{J+1}}{4(J + \frac{1}{2})}$ gegen $x = J^2 + J + 1$ eine Gerade, aus deren Steigung $-2 \cdot D_e$ die Zentrifugaldehnungskonstante D_e bestimmt werden kann. Der Ordinatenabschnitt entspricht der Rotationskonstanten $B_{v''}$.



Daraus ergeben sich die Werte:

$$D_e = 8.5 \cdot 10^{-4}$$

$$B_{v''} = 10.503 \frac{1}{\text{cm}}$$

Als Mittelwert für die beiden ermittelten Werte von D_e ergibt sich:

$$D_e = 9 \cdot 10^{-4} \frac{1}{\text{cm}}$$

Bandenursprung

Für den Bandenursprung $\tilde{\nu}_0 (1 \leftarrow 0)$ gilt

$$\frac{R_J + P_{J+1}}{2} = (v' - v'') \cdot \tilde{\nu}_e \cdot [1 - x_e (v' + v'' + 1)] + (B_{v'} + B_{v''}) \cdot (J+1)^2$$

Dies ist wiederum eine Geradengleichung mit $y = \frac{R_J + P_{J+1}}{2}$ und $x = (J+1)^2$.

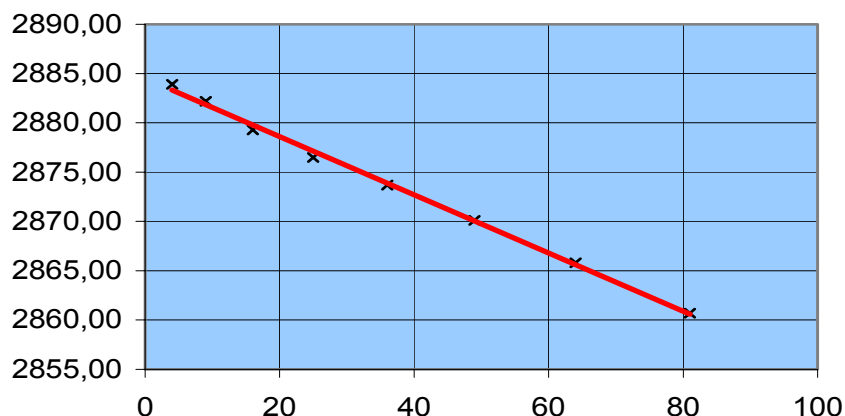
Der Achsenabschnitt entspricht dem Bandenursprung.

$$\tilde{\nu}_0 (v' \leftarrow v'') = (v' - v'') \cdot \tilde{\nu}_e \cdot [1 - x_e (v' + v'' + 1)]$$

Damit ergibt sich für den Bandenursprung des 1. Schwingungsüberganges

$$\tilde{\nu}_0 (1 \leftarrow 0) = \tilde{\nu}_e - 2 \cdot \tilde{\nu}_e x_e$$

J	$(J+1)^2$	$\frac{R_J + P_{J+1}}{2}$
		$\frac{1}{\text{cm}}$
1	4	2883.900
2	9	2882.200
3	16	2879.300
4	25	2876.500
5	36	2873.700
6	49	2870.100
7	64	2865.800
8	81	2860.700
9	100	1529.500
10	121	1536.300
11	144	1542.700



$$y = -0.2953 \cdot x + 2884.5$$

Der Achsenabschnitt entspricht dem Bandenursprung $\tilde{\nu}_0 (1 \leftarrow 0)$.

$$\tilde{\nu}_0 (1 \leftarrow 0) = 2884.5 \frac{1}{\text{cm}}$$

Schwingungswellenzahl und Anharmonizitätskonstante

Die Schwingungswellenzahl $\tilde{\nu}_e$ und die Anharmonizitätskonstante x_e können aus der Geradengleichung

$$\frac{\tilde{\nu}_0 (v' \leftarrow 0)}{v'} = \tilde{\nu}_e - \tilde{\nu}_e x_e (v' + 1)$$

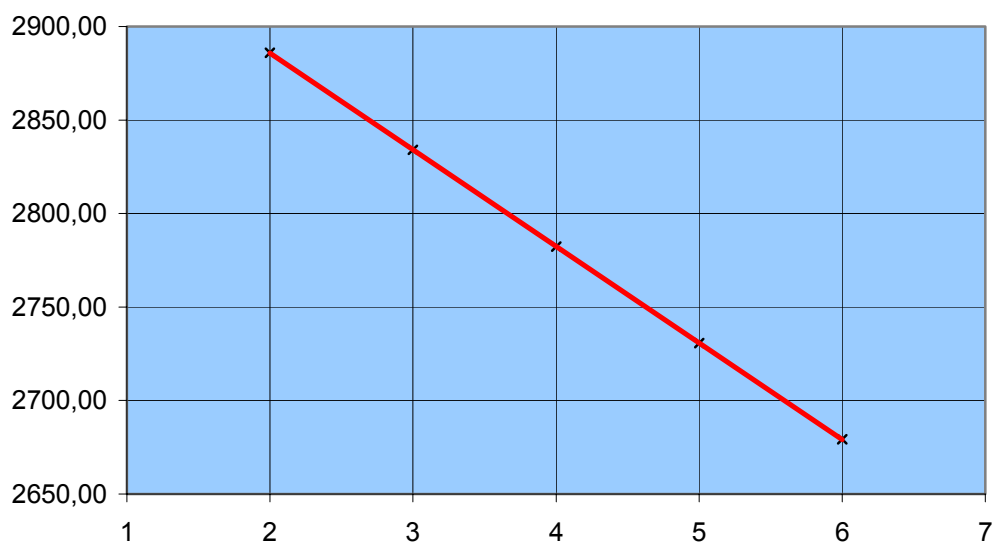
ermittelt werden. Aus dem Ordinatenabschnitt $\tilde{\nu}_e$ kann direkt die Schwingungswellenzahl abgelesen werden woraufhin aus der Steigung $-\tilde{\nu}_e x_e$ die Anharmonizitätskonstante errechnet werden kann.

$v' + 1$	$\frac{\tilde{\nu}_0 (v' \leftarrow 0)}{v'}$
	$\frac{1}{\text{cm}}$
2	2885.978
3	2883.992
4	2882.261
5	2879.703
6	2679.238

Da bei diesem Versuch keine Oberschwingungen gemessen wurden, müssen für diese bekannte Literaturwerte herangezogen werden.

Molekül-Parameter	H ³⁵ Cl	H ³⁷ Cl
	$\frac{1}{\text{cm}}$	$\frac{1}{\text{cm}}$
$\tilde{\nu}_0 (1 \leftarrow 0)$	2885.9775	2883.8705
$\tilde{\nu}_0 (2 \leftarrow 0)$	5667.9841	5663.926
$\tilde{\nu}_0 (3 \leftarrow 0)$	8346.782	
$\tilde{\nu}_0 (4 \leftarrow 0)$	10922.81	
$\tilde{\nu}_0 (5 \leftarrow 0)$	13396.19	

Quellen: J. Opt. Soc. Am. 52 (1962) 1.
J. Mol. Spectrosc. 28 (1968) 121.



$$y = -51.677 \cdot x + 2989.1$$

Der Achsenabschnitt ist die Wellenzahl der Grundschiwingung $\tilde{\nu}_e$.

$$\tilde{\nu}_e = 2989.1 \frac{1}{\text{cm}}$$

Die Steigung entspricht $-\tilde{\nu}_e x_e$

$$\tilde{\nu}_e x_e = 51.677 \frac{1}{\text{cm}}$$

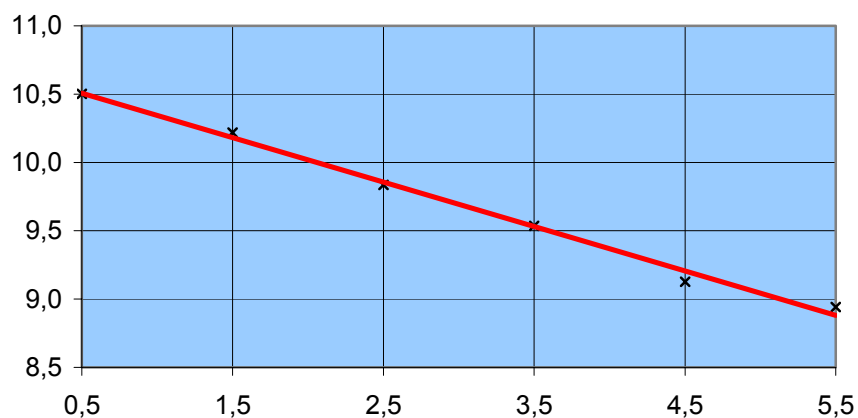
Rotationskonstante und Kopplungskonstante

Aus der Gleichung

$$B_v = B_e - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2} \right)$$

kann die Rotationskonstante B_e aus dem Achsenabschnitt und die Kopplungskonstante α_e aus der Steigung ermittelt werden. Es wurden Literaturwerte für B_v hinzugezogen.

v	$\left(v + \frac{1}{2} \right)$	B_v
		$\frac{1}{\text{cm}}$
0	0.5	10.503
1	1.5	10.218
2	2.5	9.8347
3	3.5	9.5349
4	4.5	9.126
5	5.5	8.942



$$y = -0.3252 \cdot x + 10.669$$

Der Achsenabschnitt entspricht der Rotationskonstanten B_e und aus der Steigung kann die Kopplungskonstante α_e ermittelt werden.

$$B_e = 10.669 \frac{1}{\text{cm}}$$

$$\alpha_e = 0.3252 \frac{1}{\text{cm}}$$

Trägheitsmoment und Gleichgewichtsabstand

Das Trägheitsmoment I kann bei bereits berechneter Rotationskonstante B_e aus dem folgenden Zusammenhang ermittelt werden:

$$I = \frac{h}{8 \cdot \pi^2 \cdot c \cdot B_e} = \frac{h}{8 \cdot \pi^2 \cdot c \cdot 1066.9 \frac{1}{m}} = 2.624 \cdot 10^{-47} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$$

Für den Gleichgewichtsabstand folgt dann:

$$r_e = \sqrt{\frac{I}{\mu}} = \sqrt{\frac{2.624 \cdot 10^{-47} \text{ kg} \cdot \text{m}^2}{\frac{1.35}{1+35} \cdot u}} = 1.275 \text{ Å}$$

Intensitätsverteilung der Absorption

$$\frac{N_J}{N_0} = (2J+1) \cdot e^{-\frac{Bhc}{k \cdot T} J(J+1)}$$

J	N(J)
0	1.00
1	2.71
2	3.69
3	3.81
4	3.26
5	2.40
6	1.55
7	0.88
8	0.44
9	0.20
10	0.08
11	0.03
12	0.01

Als Besetzungsmaximum wurde der Zustand $J = 3$ ermittelt, was mit dem gemessenen Wert übereinstimmt (hier geringste Transmission und somit höchste Besetzung).

Isotopeneffekt

Zur Abschätzung des Isotopeneffekts wird aus den reduzierten Massen von H^{35}Cl und H^{37}Cl der Quotient der Rotationskonstanten berechnet.

$$\frac{B_{37}}{B_{35}} = \frac{\mu_{35}}{\mu_{37}} = \frac{1.627 \cdot 10^{-24}}{1.629 \cdot 10^{-24}} = 0.998$$

Für eine Wellenzahl von etwa 2800 cm^{-1} entspricht dies einer Differenz von etwa 4 cm^{-1} .

Fehlerbetrachtung

Wert	ermittelt	Literatur	Abweichung
D_e	$9 \cdot 10^{-4} \frac{1}{\text{cm}}$	—	—
$B_{v'}$	$10.218 \frac{1}{\text{cm}}$	$10.137 \frac{1}{\text{cm}}$	0.8 %
$B_{v''}$	$10.503 \frac{1}{\text{cm}}$	$10.440 \frac{1}{\text{cm}}$	0.6 %
$\tilde{\nu}_0 (1 \leftarrow 0)$	$2884.5 \frac{1}{\text{cm}}$	$2885.9 \frac{1}{\text{cm}}$	0.05 %
$\tilde{\nu}_e$	$2989.1 \frac{1}{\text{cm}}$	$2989 \frac{1}{\text{cm}}$	0.003 %
B_e	$10.669 \frac{1}{\text{cm}}$	$10.591 \frac{1}{\text{cm}}$	0.7 %
α_e	$0.3252 \frac{1}{\text{cm}}$	$0.303 \frac{1}{\text{cm}}$	7.3 %
r_e	1.275 \AA	1.2746 \AA	0.03 %

Quelle:

Hermann Haken, Hans Christoph Wolf, Molekülphysik und Quantenchemie – Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen, 1. Auflage, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, Singapur, Springer, 1992

Die Abweichungen sind nur sehr gering und können im Hinblick auf die einfache Versuchsdurchführung überzeugen. Bei der Berechnung von α_e wurden neben den verwendeten Literaturwerten die experimentell bestimmten Werte für $B_{v'}$ und $B_{v''}$ hinzugezogen, wodurch sich hier offensichtlich eine Fehlerfortpflanzung bemerkbar macht.

Gesamtdiskussion

Dieser problemlos durchführbare Versuch bietet mit einer einfachen makroskopischen Messung die Möglichkeit, mikroskopische Eigenschaften des HCl-Moleküls in guter Näherung zu bestimmen.

Für die Auswertung mussten Literaturwerte für die Oberschwingungen herangezogen werden, da diese im Experiment nicht betrachtet wurden.

Dieses Protokoll wurde selbstständig erstellt.

Frank Bock

Benjamin Bulheller