

1.8 Infrarotspektroskopie

Ausarbeitung

Fortgeschrittenenpraktikum an der TU Darmstadt

Versuch durchgeführt von: Mussie Beian, Jan Schupp, Florian Wetzel

Versuchsdatum: 19.01.2009

Betreuer: Dipl. Phys. Sebastian Schramm



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Inhaltsverzeichnis

1.....Theorie zum Versuch.....	3
1.1. Versuchsziele:.....	3
1.2. Das elektromagnetische Spektrum von Licht:.....	3
1.3. Infrarotes Licht.....	3
1.4. Die Absorptionsspektren von mehratomigen Molekülen.....	4
1.5. Versuchsaufbau.....	4
1.6. Vergleich zwischen FT-IR und dispersiver Technik.....	5
1.7. Interferogramm.....	6
1.8. Fourier Transformation.....	6
1.9. Apodisation.....	7
1.10. Starrer Rotator.....	7
1.11. Freiheitsgrade und Schwingungstypen.....	9
2.....Versuchsdurchführung und Auswertung.....	10
2.1. Untergrundspektrum.....	10
2.2. Messung von Molekülspektren.....	13
2.2.1. Messung des CO ₂ -Spektrums mit unterschiedlichen Apodisierungen.....	13
2.2.2. Einbau der Glasküvette.....	14
2.2.3. Messung der Absorptionsspektren verschiedener Substanzen.....	15
2.2.3.1. Kohlenstoffmonoxid (CO).....	15
2.2.3.2. Chlorwasserstoff/Salzsäure (HCL).....	15
2.2.3.3. Methanol (CH ₃ OH).....	16
2.2.3.4. Methan (CH ₄).....	17
2.2.3.5. Ethylen (C ₂ H ₂).....	18
2.2.3.6. Bestimmung der Rotationsparameter.....	19
2.2.4. Messung der Absorptionsspektren verschiedener Fenstermaterialien.....	20
3.....Quellen.....	21

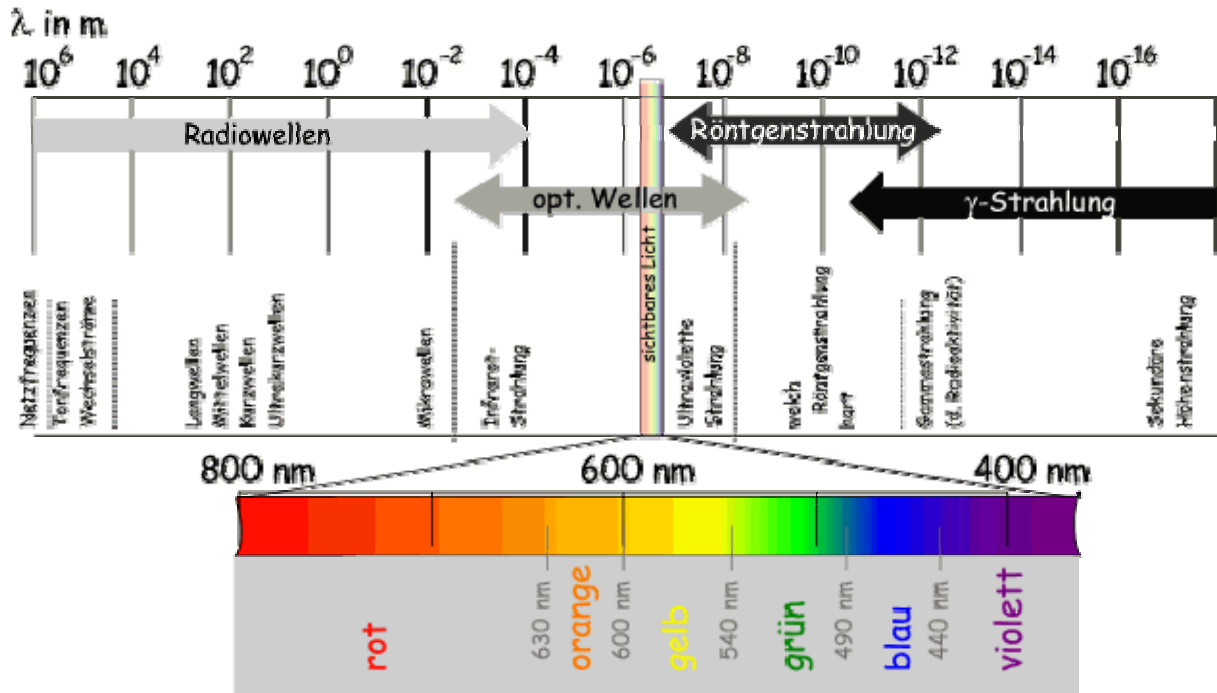
1. Theorie zum Versuch

1.1. Versuchsziele:

Das Ziel dieses Versuches ist es, sich mit der Infrarotspektroskopie vertraut zu machen. Zu diesem Zweck werden verschiedene Stoffe untersucht und anhand der erhaltenen Daten Aussagen über Eigenschaften ergründet.

1.2. Das elektromagnetische Spektrum von Licht:

In der folgenden Abbildung sieht man das elektromagnetische Spektrum von Licht:



(Quelle: http://www.roro-seiten.de/physik/lk12/emwellen/elektromagnetisches_spektrum.html)

1.3. Infrarotes Licht

Bei der Infrarotspektroskopie wird wie der Name schon sagt, Licht aus dem infraroten Bereich verwendet. Dieser Teil des Lichtes befindet sich zwischen dem für uns sichtbaren Bereich des Lichtes und den Mikrowellen. Zur besseren Unterteilung, wird das infrarote Licht in drei Untergruppen eingeteilt.

- Nah-Infrarot
Als Nah-Infrarot Bereich bezeichnet man das Licht mit einer Wellenzahl von 10^6 cm^{-1} bis 10^4 cm^{-1}
- Mittel-Infrarot
Als Mittleren-Infrarot Bereich bezeichnet man das Licht, mit einer Wellenzahl von 10^4 cm^{-1} bis 100 cm^{-1}
- Fern-Infrarot
Als Fern-Infrarot Bereich bezeichnet man das Licht, mit einer Wellenzahl von 10 cm^{-1} bis 1 cm^{-1}

1.4. Die Absorptionsspektren von mehratomigen Molekülen

Mehratomige Moleküle zeigen charakteristische Absorptionsspektren.

- Im Fern-Infrarot
Durch die in diesem Bereich absorbierte Energie wird eine Rotation des Moleküls um seine Hauptachse hervorgerufen (Rotationsspektrum).
- Im mittleren bis nahen Infrarot
Durch die in diesem Bereich absorbierte Energie wird gleichzeitig eine Rotations- und Schwingungsänderung hervorgerufen (Rotationsschwingungsspektren).
- Im nahen Infrarot, im sichtbaren Teil des Lichtes und teilweise im UV-Bereich
Durch die in diesem Bereich absorbierte Energie wird eine Änderung der Rotationsenergie, der Schwingungsenergie und der Anregungsenergie der Niveaus der in der Molekülhülle befindlichen Elektronen hervorgerufen.

In diesem Versuch werden wir uns auf die Untersuchung der Rotationsschwingungsspektren beschäftigen.

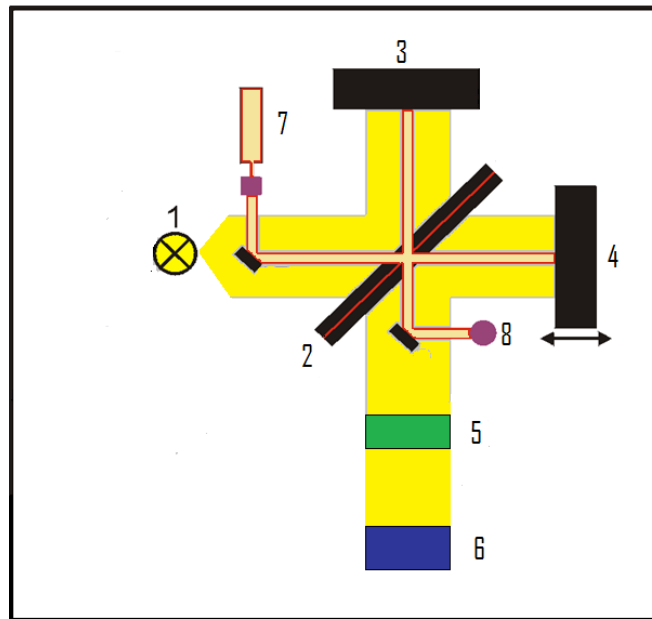
1.5. Versuchsaufbau



(Quelle: http://www.fkp.tu-darmstadt.de/exp/fp/fp1_80/index.de.jsp)

In diesem Versuch verwenden wir ein FTIR-Spektrometer. Dieser Typ des Spektrometers besitzt den Vorteil, dass wir alle Wellenlängen gleichzeitig messen können. Die gemessenen Daten werden in einem Interferogramm ausgegeben. Durch eine Einstellung kann man sich jedoch direkt ein Spektrum anzeigen lassen. Dies erzeugt das Programm durch eine Fouriertransformation. Dies wird schon mit den Buchstaben FT im Namen des Spektrometers angegeben.

Die folgende Skizze zeigt den vereinfachten Aufbau des FTIR-Spektrometers:



(Vorlage: <http://www.ir-spektroskopie.de/> angepasst mit Paint)

- 1: Die **Lichtquelle** liefert das zur Untersuchung benötigte Licht
- 2: Durch den **Strahlteiler** wird der einfallende Strahl in zwei Teilstrahlen aufgeteilt.
- 3: Der **feste Spiegel** reflektiert den einfallenden Lichtstrahl wieder in Richtung des Strahlteilers
- 4: Der **verschiebbare Spiegel** reflektiert den einfallenden Strahl wieder in Richtung des Strahlteilers. Hierbei kann der Spiegel verschoben werden um eine unterschiedliche Weglänge zwischen Strahlteiler und Spiegel zu erzeugen.
- 5: Zu untersuchende **Probe**
- 6: Der **Detektor** misst die Intensität des auftretenden Lichtes
- 7,8: Der **Laser**(7) und der zweite **Detektor**(8) werden verwendet um über die bekannte Wellenlänge die Verschiebung der Weglänge möglichst genau messen zu können.

Hierbei entsprechen die die Punkte 2 – 4 dem Aufbau eines Michelson-Interferometers.

1.6. Vergleich zwischen FT-IR und dispersiver Technik

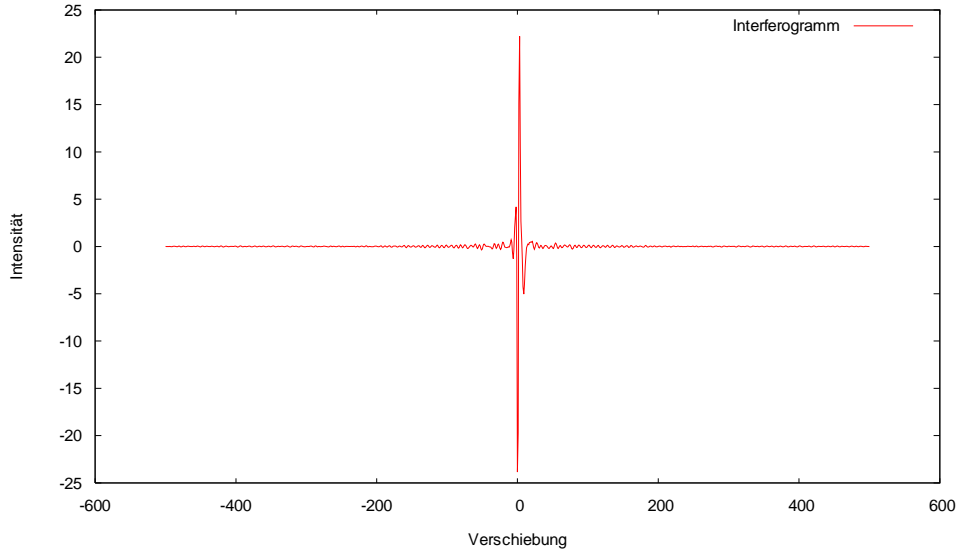
Bei Interferogrammen greift man auf verschiedene Techniken zurück. Die am häufigsten verwendeten Interferometer arbeiten mit dispersiver Technik oder nach der FT-IR Methode.

Bei der dispersiven Technik erfolgt die Zerlegung des Infrarotspektrums durch Monochromatisierung mit Hilfe von Gittern und Prismen; bei der FT-IR-Technik wird das gesamte Spektrum untersucht und anschließend mit Hilfe einer Fourier-Transformation zerlegt.

Vergleicht man FT-IR und disperseive Technik, so lässt sich zunächst der kompliziertere Aufbau der FT-IR Methode nennen. Allerdings liegen die Vorteile der FT-IR Methode beispielsweise an den nicht vorhandenen Spalten, wodurch keine Blendenwirkung auftritt. Hierdurch erreicht die gesamte Energie den Detektor und trägt somit zum Signal bei und es kann ein besseres Rausch-Signal-Verhältnis erreicht werden. Ein weiterer Vorteil dieser Methode liegt darin, dass man alle Wellenlängen simultan und während der gesamten Messung detektiert werden. Dies führt zu einer deutlichen Zeitersparnis im Vergleich zu dispersiven Methoden. Desweiteren kann durch die zusätzliche Verwendung eines He-Ne-Lasers eine sehr exakte Messung der Spiegelverschiebung vorgenommen werden.

1.7. Interferogramm

Durch die Variation der Weglänge von einem der beiden aufgeteilten Lichtstrahlen im Michelson Interferometer interferieren nacheinander die unterschiedlichen Wellenlängen. In einem Interferogramm werden die am Detektor gemessenen Intensitäten in Abhängigkeit dieser variablen Weglänge aufgetragen.



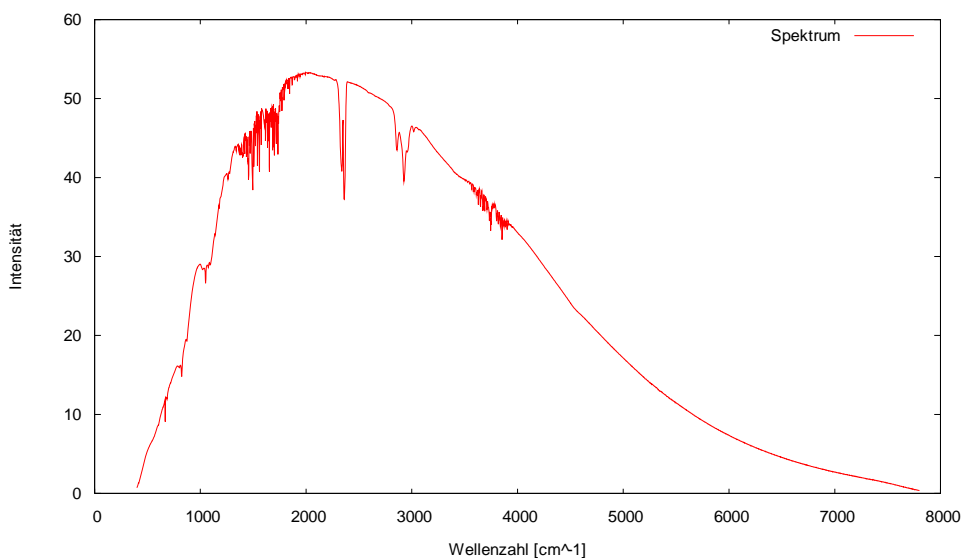
1.8. Fourier Transformation

Um das erhaltene Interferogramm in ein diskretes Spektrum umzuwandeln, müssen wir dies mit Hilfe der Fourier Transformation nach den einzelnen Funktionen auflösen.

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

In dieser Gleichung entspricht $F(k)$ dem zu berechnenden Spektrum und $f(x)$ dem auszuwertenden Interferogramm. Integriert wird über die Verschiebung des Spiegels, die mit x bezeichnet ist. Desweiteren bezeichnet k die Wellenzahl.

Somit erhalten wir ein diskretes Spektrum:



1.9. Apodisation

Da das benutzte Michelson-Interferometer nur eine begrenzte Weglänge für die Verschiebung des variablen Spiegels zur Verfügung hat, kann man nicht alle Wellenlängen von $-\infty$ bis $+\infty$ durchmessen. Aus diesem Grund bricht das Interferogramm an einer bestimmten Stelle ab. Dieser Abbruch führt bei der Fourier-Transformation dazu, dass sich neben dem eigentlichen Maximum noch künstliche Nebenmaxima bilden. Die Nebenminima entstehen nur durch den abrupten Abbruch des Interferogramms und sagen nichts über die Eigenschaften der Probe aus. Um diesen nicht erwünschten Effekt zu minimieren, wird das Interferogramm mit einer passenden Funktion multipliziert. Zur Apodisation, was übersetzt „Füßchen abschneiden“ heißt, standen uns in diesem Versuch drei verschiedene Funktionen zur Verfügung.

- Boxcarfunktion (Rechteckfunktion)
- Trapezfunktion
- Dreiecksfunktion

Hierbei liegen die Unterschiede der verschiedenen Apodisierungen darin, dass bei der Boxcarfunktion die komplette Intensität ausgewertet werden kann und somit die beste Auflösung erreicht wird. Der Nachteil bei dieser Methode liegt jedoch darin, dass bei dieser Apodisierung die Seitenmaxima am größten sind. Bei der Dreiecksfunktion werden die Nebenmaxima stark reduziert, jedoch wird hierbei die Intensität teilweise mit einem Faktor <1 gewichtet, was zu einer Verschlechterung der Auflösung führt.

1.10. Starrer Rotator

Geht man von einem starren Rotator aus, d.h. man nimmt an, dass der Abstand der beiden Moleküle unabhängig von der Rotation ist, so spricht man vom Modell des starren Rotators. Durch diese Betrachtung können die kinetischen Energien der Rotation klassisch mit Hilfe der Formel

$$E = \frac{1}{2} \theta \omega^2$$

Berechnet werden.

Hierbei steht ω für die Kreisfrequenz der Rotationsbewegung und θ für das Trägheitsmoment um eine Achse senkrecht zur Hantelachse.

Das Trägheitsmoment setzt sich aus der reduzierten Masse $\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$ [Kg] und dem Abstand r_0 der Massen m_1 und m_2 zusammen.

$$\theta = \mu r_0^2$$

Klassisch lautet der Drehimpuls

$$\vec{J} = \theta \cdot \vec{\omega}$$

Somit lässt sich die Energie mit der Formel

$$E = \frac{J^2}{2\theta}$$

schreiben.

Quantenmechanisch erhält man durch Quantisierung des Drehimpulses

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

Diskrete Rotationszustände der Energie

$$E = \frac{J(J + 1)\hbar^2}{2\theta}$$

Hierbei sind:

J = Quantisierter Drehimpuls, Drehimpulsquantenzahlen

θ = Trägheitsmoment um die Achse senkrecht zur Hantelachse

\hbar = Plank'sches Wirkungsquantum

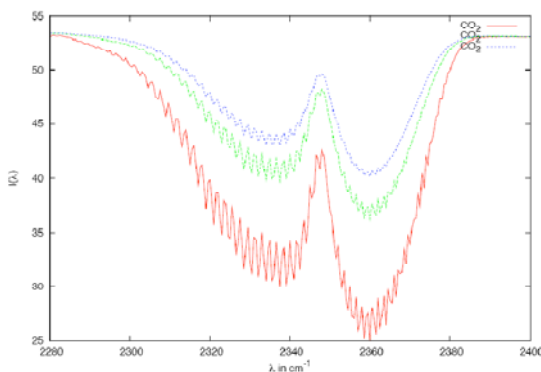
Durch Ausdrücken der Energie in der Einheit von $h \cdot c$ erhalten wir die Formel:

$$E = B \cdot J(J + 1) \text{ mit } B = \frac{\hbar}{4\pi\theta c} [\text{cm}^{-1}]$$

Lässt man nun zu, dass die Atome in einem harmonischen Potential gegeneinander schwingen, so überlagern sich die Rotationsenergien nach dem Modell des Harmonischen Oszillators nach folgender Formel:

$$E_{ges} = h \cdot c \cdot B \cdot J(J + 1) + \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Im Spektrum werden die Unterschiede der verschiedenen Übergänge deutlich. Im nebenstehenden



Spektrum erkennt man zu jedem Graph zwei Zweige, die P- und R-Zweig genannt werden. Dabei entspricht der kleinere, linke P-Zweig einem Übergang mit $\Delta J = -1$ und der größere, rechte R-Zweig einem mit $\Delta J = +1$.

Der Größenunterschied besteht aufgrund der verschiedenen Wahrscheinlichkeiten für die Übergänge. Da bei Raumtemperatur die unteren Energiezustände vorrangiger besetzt sind, sind die Übergänge $J+1$ wahrscheinlicher und treten damit häufiger auf.

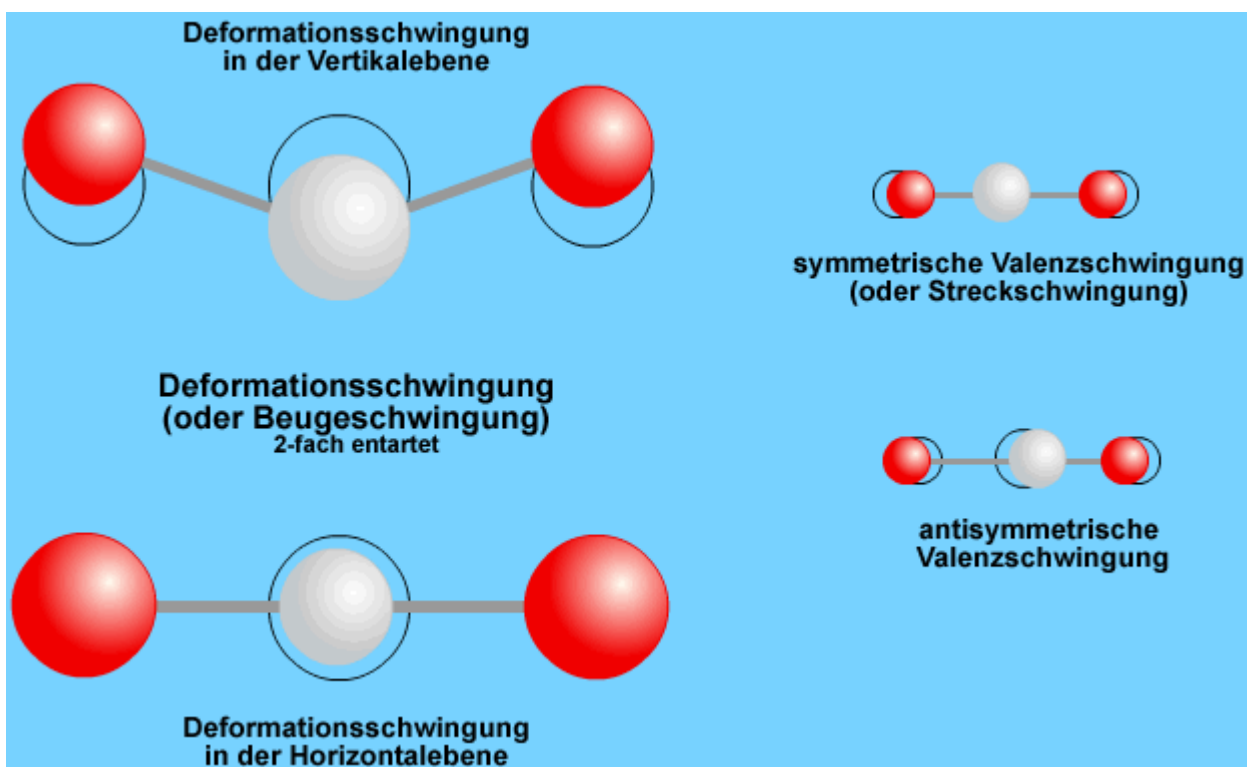
Darüberhinaus spricht man bei Übergängen von $J \pm 0$ vom so genannten Q-Zweig, der zwischen den anderen beiden Zweigen liegt. Diesen Zweig kann man jedoch nur bei

wenigen Materialien erkennen. Das hängt damit zusammen, dass sich bei diesem Übergang zwar der Drehimpuls des ankommenden Elektrons ändert, jedoch nicht der Rotationszustand des Moleküls. Somit kann dieser Übergang nur bei Atomen auftreten, deren Drehimpulskomponente in Richtung der Kernverbindungsachse zeigt.

1.11. Freiheitsgrade und Schwingungstypen

Jedes Atom besitzt im ungebundenen Zustand drei Freiheitsgrade der Translation. Bei mehratomigen Molekülen kommen zudem noch Rotations- und Schwingungsfreiheitsgrade hinzu. Beispielsweise hat ein 2-atomiges Molekül zwei Rotationsfreiheitsgrade. Die Verbindungsachse der Atome wird bei linearen Molekülen als Rotationsachse nicht mitgezählt, da dieser Freiheitsgrad energetisch vernachlässigbar ist. Außerdem kommt noch ein Schwingungsfreiheitsgrad hinzu, der einer Schwingung der beiden Atome gegeneinander entspricht. Bei größeren Molekülen gibt es bei den Schwingungsfreiheitsgraden zu viele Schwingungstypen (z.B. symmetrische und antisymmetrische Streck-, Schaukel-, Deformations-, Dreh- und Wippschwingungen), als dass hier alle Freiheitsgrade größerer Moleküle behandelt werden können. Die Anzahl der Freiheitsgrade lässt sich jedoch für lineare und nicht lineare N-atomige Moleküle, wie folgt ermitteln:

	Translation	Rotation	Schwingung
linear	3	2	$3N-5$
nicht linear	3	3	$3N-6$



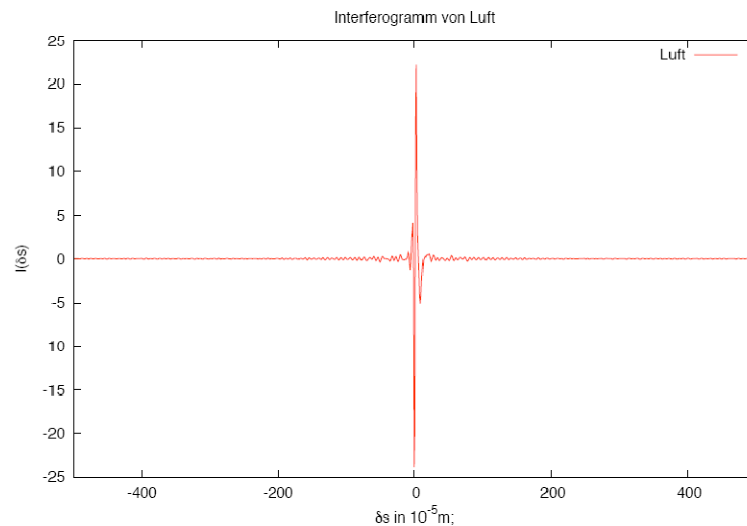
(Bildquelle:

http://www.chemgapedia.de/vsengine/media/vsc/de/ch/3/anc/ir_spek/schwspek/mol_spek/ir3_1/dreiatomlinear_m19bi0300.gif)

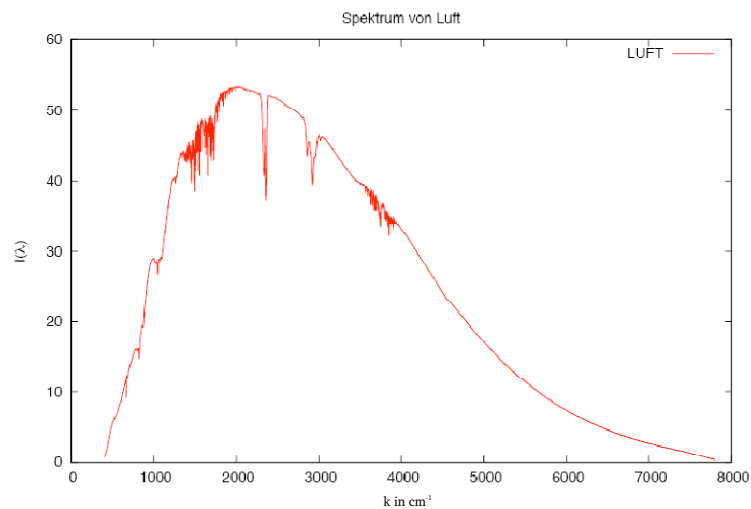
2. Versuchsdurchführung und Auswertung

2.1. Untergrundspektrum

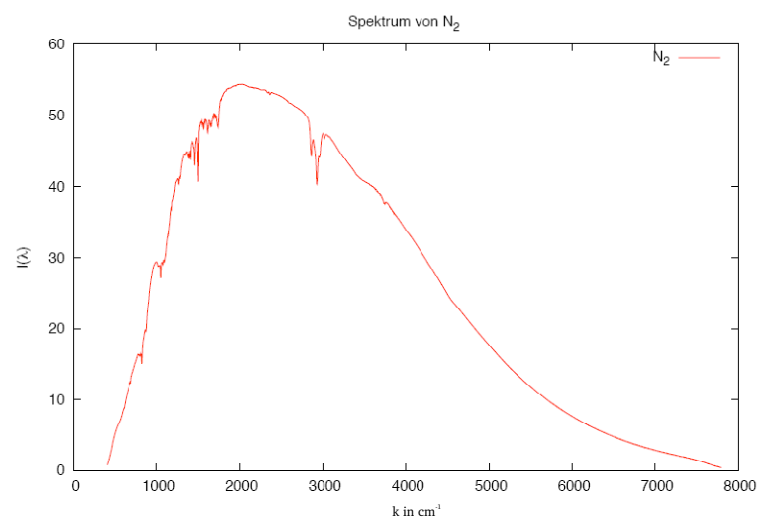
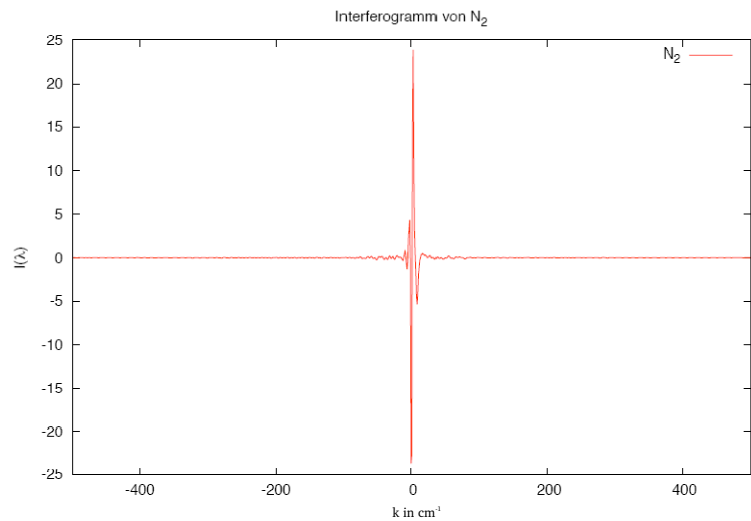
Um das Untergrundspektrum auszuwerten, haben wir zunächst ein Interferogramm des mit Luft gefüllten Probenraums aufgenommen.



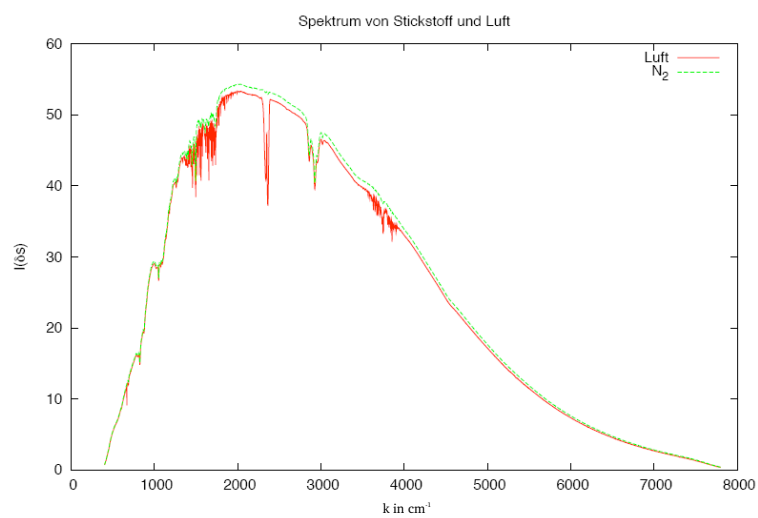
Anschließend haben wir in einer neuen Messung durch eine Einstellung des IRFT eine FFT durchführen lassen, wodurch uns ein Spektrum des leeren Probenraums dargestellt wurde.



Die gleichen Messungen haben wir erneut durchgeführt, nachdem wir den leeren Probenraum komplett mit Stickstoff (N_2) gefüllt hatten. Da sich Luft unter anderem aus Sauerstoff, Kohlenstoffdioxid, Kohlenstoffmonoxid, Stickstoff und Wasser zusammensetzt, zeigt das Spektrum von Luft viele charakteristische Linien, die bei der Auswertung der Proben unerwünscht sind. Die Messergebnisse dieser Messungen haben wir im folgenden Plot dargestellt:



Stellt man die Spektren von Luft und Stickstoff in einem Plot dar, so kann man an den Flanken Unterschiede in Intensität und verschiedenen Absorptionsmaxima erkennen.

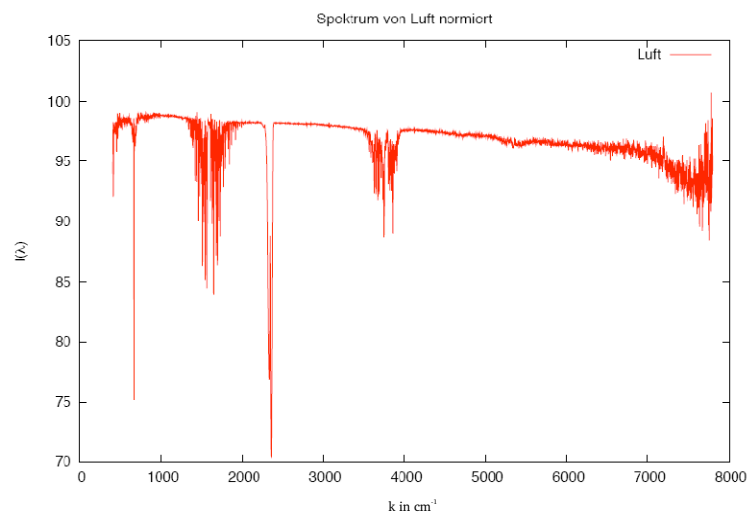


Mit Vergleichswerten aus der Literatur konnten wir folgenden Absorptionsmaxima folgende Stoffe zuordnen:

Wellenzahl k/cm^{-1}	Stoff	Schwingungstyp
670	CO ₂	Deformationsschwingung
1600	H ₂ O	breite Bande
2300	CO ₂	asymmetrische Valenzschwingung
3700	H ₂ O	symmetrische & asymmetrische Valenzschwingungen

Da N₂ im IR-Spektrum keine Absorption zeigt, rühren die übrigen Absorptionsmaxima von der Apparatur (Spiegel, Linsen,...). z.B. bei $k = 3000cm^{-1}$

Das Spektrum von N₂ nutzen wir im Folgenden als Untergrundspektrum, auf das wir die übrigen Spektren normieren. Hier sieht man das normierte Spektrum von Luft:



2.2. Messung von Molekülspektren

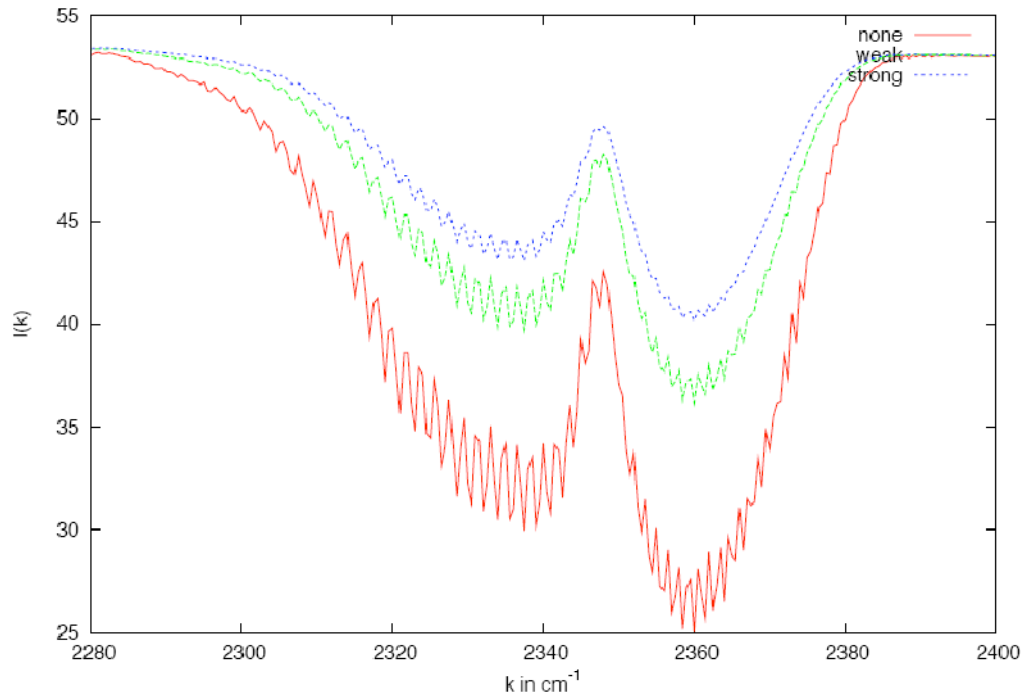
2.2.1. Messung des CO₂-Spektrums mit unterschiedlichen Apodisierungen

Wir haben die Messküvette mit CO₂ geflutet und anschließend 3 Spektralmessungen durchgeführt, die sich in der Art der Apodisierung voneinander unterscheiden.

Der Computer bot dabei folgende Einstellmöglichkeiten:

„none“ – Rechteckapodisierung, „weak“ – Trapezapodisierung, „strong“ – Dreiecksapodisierung

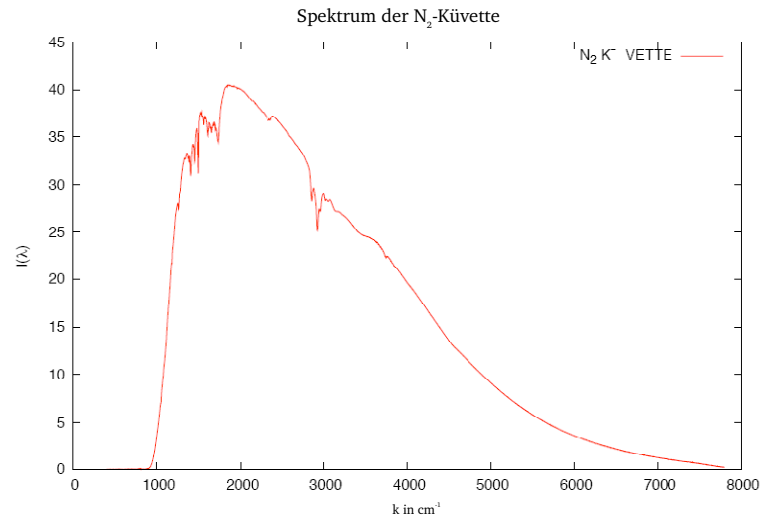
Mithilfe dieser Messungen erhielten wir folgende Spektren:



Betrachtet man die normierten Spektren von CO₂, so erkennt man jeweils bei ca. 2300cm^{-1} den für CO₂ typischen Peak, der bei stärkerer Vergrößerung die im Theorieteil behandelten P- und R-Zweige enthält. Anhand eines Vergleichs der Spektren konnten wir die im Theorieteil diskutierten Auffälligkeiten bestätigen: Man erkennt sehr deutlich eine Amplitudenabschwächung (none → strong). Etwas weniger deutlich konnten wir die Abschwächung des Rauschens (Apodisation – „Füßchen weg!“) an den Rändern feststellen. Nur erahnen hingegen konnten wir die Verschlechterung der Auflösung, die sich durch eine Vergrößerung der Halbwertsbreite hätte zeigen sollen.

2.2.2. Einbau der Glasküvette

Zunächst haben wir eine Leermessung einer mit Stickstoff befüllten Glasküvette durchgeführt. Hierfür erhielten wir folgendes Spektrum:

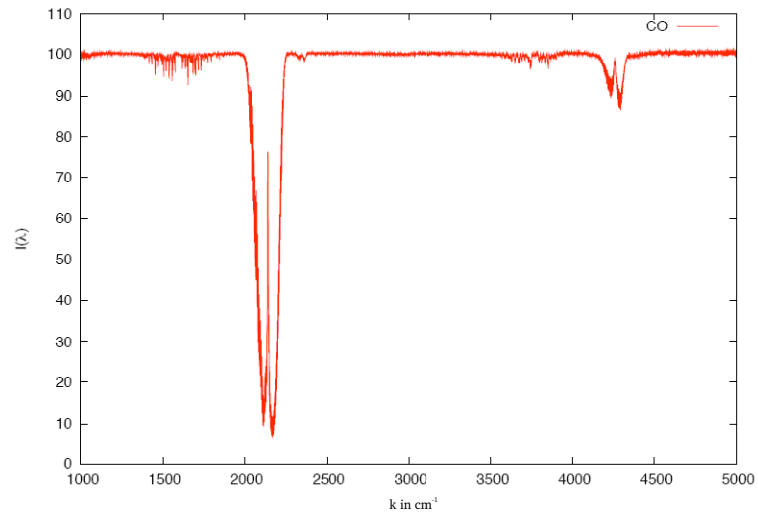


Im Spektrum erkennt man deutlich, dass die verwendete Küvette bei Wellenzahlen unter $k = 1000$ nicht eingesetzt werden kann, da sie bis zu diesem Bereich das eingestrahlte Infrarotlicht vollständig absorbiert. Um eine größere Auflösung im interessanten Wellenzahl-Bereich zu erhalten, begrenzten wir den folgenden Messbereich außerdem für Wellenzahlen über $k = 5000$. Zunächst haben wir eine weitere Leermessung des mit Stickstoff befüllten Küvette im neuen Messbereich aufgenommen, mit der wir die folgenden Messungen normierten.

2.2.3. Messung der Absorptionsspektren verschiedener Substanzen

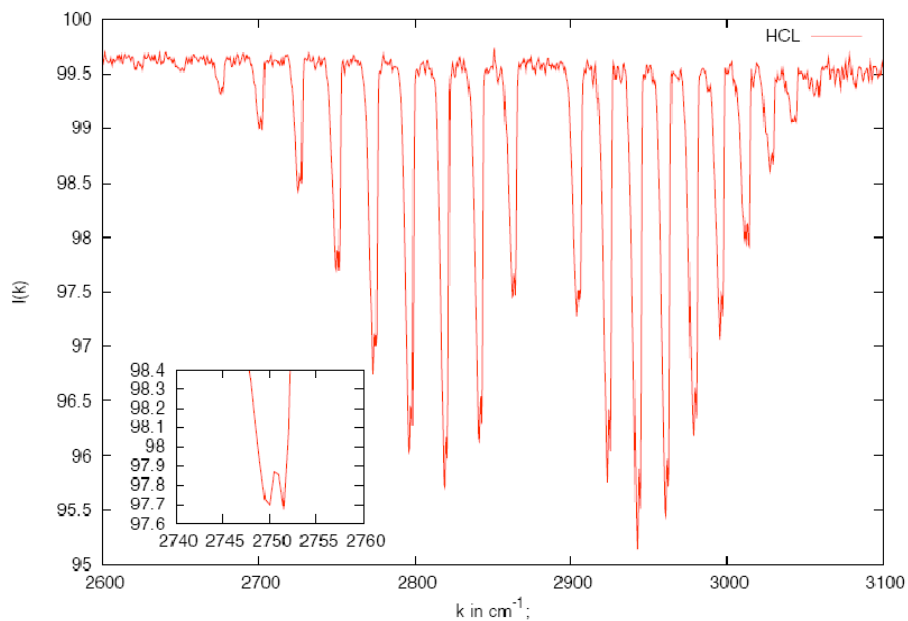
Im Folgenden diskutieren wir die Besonderheiten der verschiedenen Substanzen stets an den normierten Spektren.

2.2.3.1. Kohlenstoffmonoxid (CO)



Bei $k = 2140$ erkennt man einen sehr starken Peak mit P- und R-Zweig. Bei $k = 4260$ kann man die erste Oberschwingung dieser Absorptionsmaxima sehen. Diese entsprechen den hier zu erwartenden symmetrischen Valenzschwingungen.

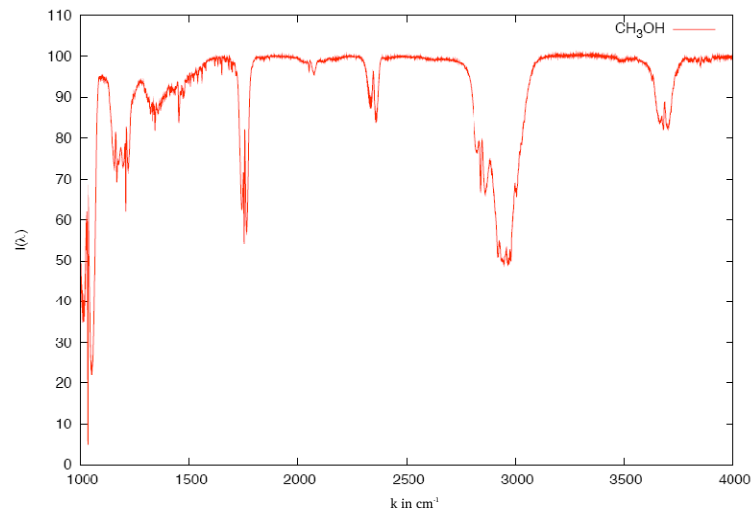
2.2.3.2. Chlorwasserstoff/Salzsäure (HCL)



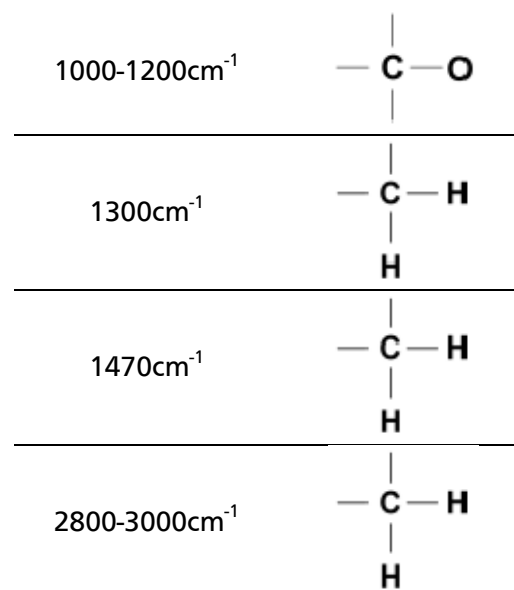
Beim Spektrum von Chlorwasserstoff konnte man eine Doppelpeakstruktur erkennen.

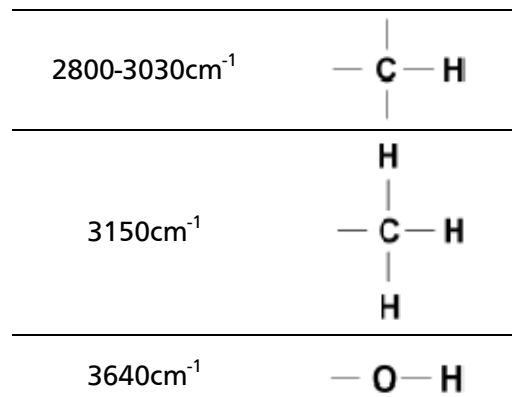
Die Doppelpeakstruktur ist mithilfe der verschiedenen Chlor-Isotope Cl^{35} und Cl^{37} erklärbar. Die Rotationsenergie ergibt sich aus: $E_{rot} = \frac{\hbar}{4\pi\theta c} J(J+1)$. Das Trägheitsmoment berechnet sich zu: $\theta = \mu * r_0^2$ mit der reduzierten Masse $\mu = \frac{m_1 * m_2}{m_1 + m_2}$. Aus diesen Gleichungen wird ersichtlich, dass das Chlorwasserstoffmolekül HCl^{37} mit der größeren Masse die kleinere Rotationsenergie hat. Mithilfe von $E = h * \nu = \frac{h * c}{\lambda} = h * c * k$ kann man nun diesem Molekül mit der größeren Rotationsenergie den Peak mit der jeweils höheren Wellenzahl zuordnen.

2.2.3.3. Methanol (CH_3OH)



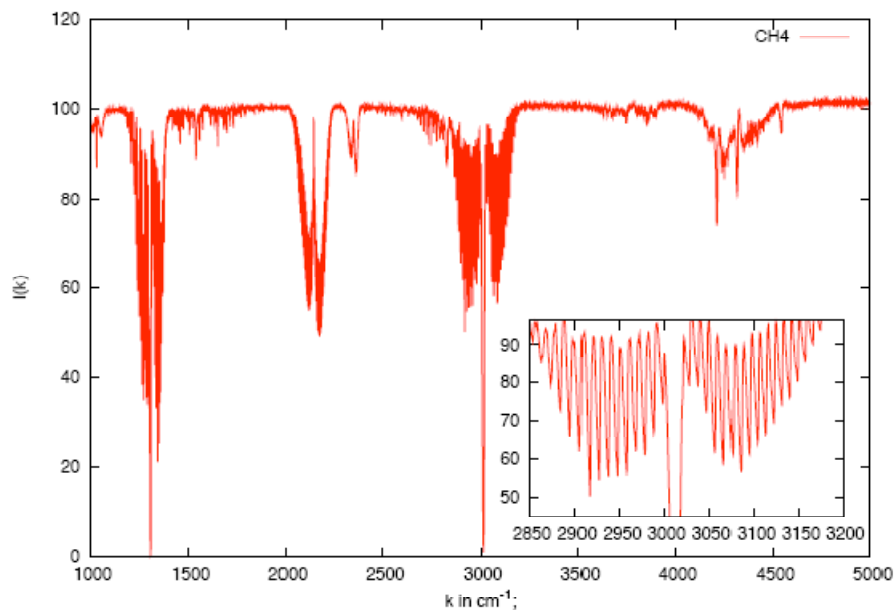
Anhand der bekannten Schwingungsfrequenzen für verschiedene Molekülbauteile (siehe Theorieteil) kann man die Peaks des Spektrums von Methanol auf folgende Molekülbauteile zurückführen:





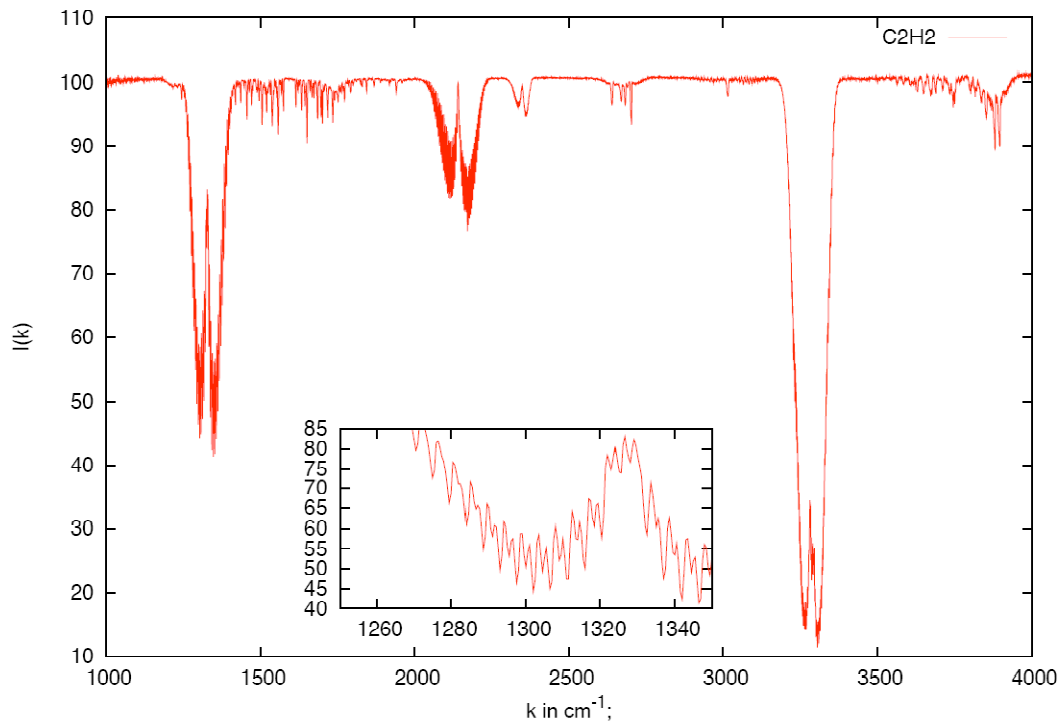
Der Peak bei $k \approx 3150 \text{ cm}^{-1}$ ist in unserer Messung zwar nicht erkennbar gewesen, wird hier der Vollständigkeit halber jedoch trotzdem aufgeführt.

2.2.3.4. Methan (CH_4)



Das Methan-Molekül ist Tetraeder-förmig angeordnet. Dadurch sollte man auf den ersten Blick kein Dipolmoment und folglich auch keine Absorptionen vermuten. Allerdings kann das Molekül bei gewissen Schwingungen durchaus ein induzierte Dipolmomente aufweisen. Je nach Schwingungstyp fällt dieses kleiner oder größer aus. Die im Spektrum erkennbaren Peaks sind verschiedenen dieser Schwingungstypen zuzuordnen.

2.2.3.5. Ethylen (C₂H₂)



In diesem Spektrum fällt ein alternierender Intensitätswechsel der Absorptionsmaxima auf. Dies ist auf die lineare Struktur des Ethylen-Moleküls zurückzuführen. Die außenliegenden Wasserstoffmoleküle können parallelen oder antiparallelen Spin haben. Nach dem Pauli-Gebot ist die gesamte Wellenfunktion eines fermionischen Systems antisymmetrisch bezüglich der Vertauschung zweier Teilchen. Das bedeutet, dass die Parität des Systems $P_\psi = -1$ ist. Die Parität setzt sich aus dem Produkt der Paritäten der Spin- und der Ortswellenfunktion zusammen: $P_\psi = P_S * P_O$. Im Fall, dass die Spins der Wasserstoffmoleküle parallel sind, also $P_S = +1$, muss daher $P_O = -1$ sein, bzw. im antiparallelen Fall eben genau umgekehrt. Daraus folgt, dass der quantisierte Drehimpuls J im parallelen Fall ungerade und im antiparallelen Fall gerade sein muss. Da der Drehimpuls bei einem Phasenübergang gerade bzw. ungerade bleibt, muss $\Delta J = \pm 2$ sein. Das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten für einen geraden zu einem ungeraden quantisierten Drehimpuls liegt bei 3:1.

Ein ähnliches Phänomen tritt auch bei Kohlendioxid auf, das eine ähnliche lineare Struktur aufweist. Da die außenliegenden Sauerstoffatome im Gegensatz zu den Wasserstoffmolekülen zu den Bosonen zählen, ist die Parität des Systems $P_\psi = +1$. Da das Sauerstoffmolekül eine gerade Anzahl an Kernteilchen hat, ist die Parität der Spinwellenfunktion stets $P_S = +1$. Dadurch ist auch für die Ortswellenfunktion nur $P_O = +1$ erlaubt. Dadurch kommen nur gerade quantisierte Drehimpulse in Frage, wodurch im Spektrum von Kohlendioxid nur jedes zweite Peak im Vergleich mit Ethylen sichtbar ist. Um dies nachzuweisen, könnte man ein Spektrum von Kohlendioxid mit zwei unterschiedlichen O-Isotopen aufnehmen. In diesem Fall würde man auch die Peaks zu den ungeraden quantisierten Drehimpulsen sehen.

2.2.3.6. Bestimmung der Rotationsparameter

Um die Rotationsparameter B_0, B_1, B_e, α zu bestimmen, muss man die Gleichungen (5) aus dem Aufgabenblatt geschickt miteinander verrechnen und nach B_0 bzw. B_1 auflösen:

$$B_1 = \frac{\tilde{\nu}_R(J) - \tilde{\nu}_P(J)}{4J+2}; B_0 = \frac{\tilde{\nu}_R(J) - \tilde{\nu}_P(J+2)}{4J+6}$$

Durch die Übergangsregel J+2 bei Kohlenstoffdioxid, ändern sich die Rotationsparameter zu:

$$B_1 = \frac{\tilde{\nu}_R(J) - \tilde{\nu}_P(J)}{8J+4}; B_0 = \frac{\tilde{\nu}_R(J) - \tilde{\nu}_P(J+4)}{8J+20}$$

Aus diesen Parametern lassen sich die restlichen berechnen:

$$B_e = \frac{3B_0 - B_1}{2}; \alpha = 2(B_e - B_0)$$

Bei den linearen, zweiatomigen Molekülen (CO, HCL) sind zudem noch das Trägheitsmoment

$\theta = \frac{h}{8\pi^2 c B_e}$, den Gleichgewichtsabstand $r_{equ} = \sqrt{\frac{\theta}{\mu}}$ und die Federkonstante $k = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{equ}^3}$ zu berechnen.

	CO	HCL	CO ₂	CH ₄
B_0/cm^{-1}	1,92655	10,4714	0,422955	5
B_1/cm^{-1}	1,96001	10,2292	0,357246	4,9375
B_e/cm^{-1}	1,97674	10,5925	0,4558095	5,03125
α/cm^{-1}	0,03346	0,2422	0,06571	0,000625
$\theta/10^{-46} kg m^2$	1,41611	0,26427		
$r_{equ}/10^{-10} kg$	1,11492	1,27429		
$k/N m^{-1}$	332,9	223		

Zum Vergleich die Literaturwerte aus: *Haken, H.; Wolf, H.-C. (1990). Atom- und Quantenphysik. 4. Auflage. Berlin: Springer*

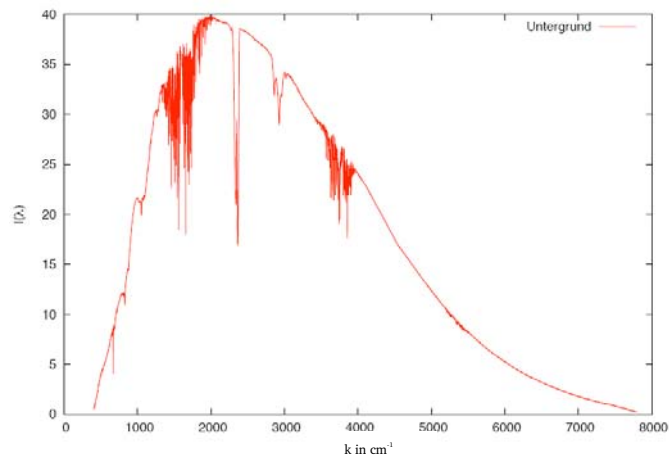
	CO	HCL	CO ₂	CH ₄
B_0/cm^{-1}	-	10,440	-	5,241
B_1/cm^{-1}	-	10,137	-	-
B_e/cm^{-1}	1,924	10,591	0,39	-
α/cm^{-1}	0,00091	0,303	-	-
$\theta/10^{-46} kg m^2$	-	-	-	-
$r_{equ}/10^{-10} kg$	-	1,2746	-	-
$k/N m^{-1}$	-	480	-	-

Unsere experimentell bestimmten Werte stimmen in guter Näherung mit den hier angegebenen Literaturwerten überein.

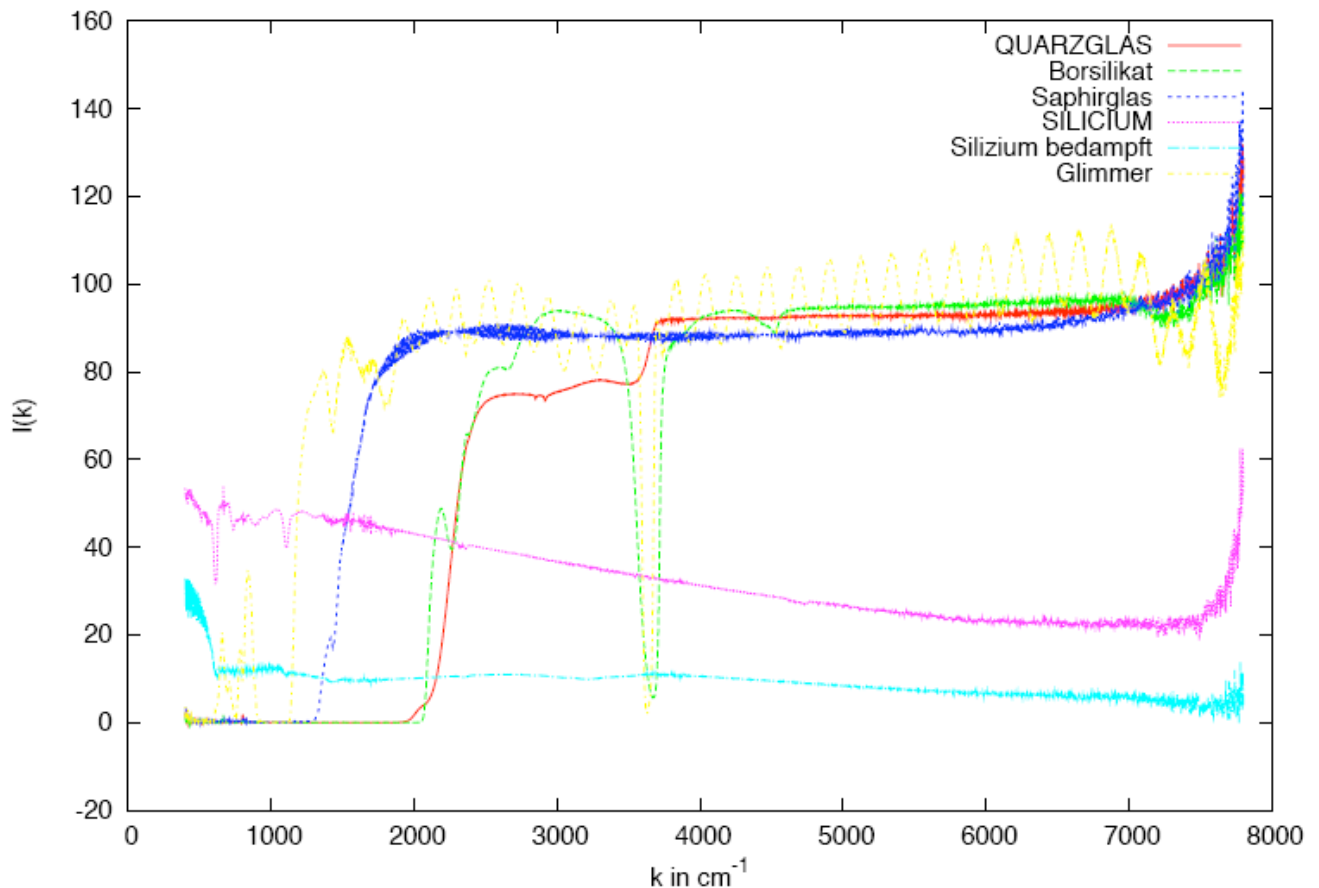
2.2.4. Messung der Absorptionsspektren verschiedener Fenstermaterialien

Um die Absorptionsspektren verschiedener Fenstermaterialien aufnehmen zu können, mussten wir zunächst einen neuen Probenhalter in die Apparatur einbauen, in die die Gläser eingespannt werden konnten.

Zunächst führten wir wieder eine Untergrundmessung durch, mithilfe derer wir anschließend die anderen Spektren normierten.



In folgendem Diagramm sind die Spektren der untersuchten Fenstermaterialien zu sehen. (Quarzglas, Borsilikatglas, Saphir, Glimmer, Silizium, bedampftes Silizium)



Bei den Silikat-haltigen Materialien (Quarzglas, Borsilikatglas, Glimmer) erkennt man das für Silikate typische Absorptionsmaxim bei $k = 3700\text{ cm}^{-1}$.

Anhand der aufgetragenen Spektren erkennt man die Einsatzbereiche der unterschiedlichen Gläser. Beispielsweise Borsilikat absorbiert alles im Bereich $k < 2000\text{ cm}^{-1}$. Im Bereich $2500\text{ cm}^{-1} < k < 3600\text{ cm}^{-1}$ lässt es hingegen beinahe vollständig das eingestrahlte Infrarotlicht hindurch, ebenso im Bereich $k > 3800\text{ cm}^{-1}$.

Beim Glimmer fällt noch eine gewisse Periodizität auf, die auf die Struktur dieses Materials zurückzuführen ist. Dieses besteht nämlich aus vielen, dünnen Schichten, an denen jeweils das eingestrahlte Infrarotlicht zu einem gewissen Teil transmittiert bzw. reflektiert wird. Dadurch, dass verschiedene Wellenzahlen unterschiedliche Gangunterschiede erfahren, kommt es wellenzahlabhängig zu konstruktiver bzw. destruktiver Interferenz. Dies wird durch die beschriebene Periodizität sichtbar.

3. Quellen

<http://www.carstenbundesmann.de/ftir/ftir.html>

<http://www.ir-spektroskopie.de/>

Haken, H.; Wolf, H.-C. (1990). Atom- und Quantenphysik. 4. Auflage. Berlin: Springer