

Robert Strothmann, 5040218
Jonas Schulz, 5153815
David Ueberle, 4903184

Jonas.Scholz@fu-berlin.de
Robert.Strothmann@fu-berlin.de
Ueberleda@zedat.fu-berlin.de

Laborbericht / Versuchsprotokoll

S2 - Molekülspektroskopie auf dem Rechner

Datum der Versuchsdurchführung: 7. Mai 2018
Datum der Protokolleinreichung: 21. Mai 2018
Assistent/in: Dr. Roman Flesch
Dateiname: S2-5040218-5153815-4903184-1

Mit der Einreichung wird versichert, dass das Protokoll von den oben eingetragenen Personen in gemeinschaftlicher Arbeit angefertigt worden ist und dass sämtliche Quellen, die zur Erstellung des Protokolls genutzt wurden, im 8. Teil des Protokolls (Literatur) kenntlich gemacht worden sind.

1 Einleitung

Befasst man sich mit der Spektroskopie, so betrachtet man im wesentlichen die Beschreibung von Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie. Dieses Teilgebiet der Physik findet in jeder Naturwissenschaft, bis hin zur Medizin, große Anwendungsmöglichkeiten, z.B als Analysemethode. In der organischen und anorganischen Chemie kann unter anderem durch geeignete Messungen die Reinheit eines Stoffes überprüft werden. Neben der Anwendung ist die Theorie der Spektroskopie, insbesondere der Molekülspektroskopie, für das Verständnis von photoneninduziertem Energietransportprozesse in einem chemischen System essenziell. Viele physikochemische Probleme konnten erst durch eine Betrachtung über die Spektroskopie gelöst werden, was ein tiefgreifendes Verständnis von Spektroskopie motivieren kann.

2 Theoretische Grundlagen

Formalisierte Spektroskopie kann die Absorption unseres quantenmechanischen Systems, in unserem Beispiel die Moleküle Kohlenstoffmonoxid und Chlorwasserstoff, als eine Interaktion der Wellenfunktion dieser Systeme mit dem Photon (ebenfalls als eine Funktion darstellbar) beschreiben. Durch diese Überlegung folgt die für die Chemie relevante Bedingung für die Existenz von Rotationsspektren – nur Moleküle mit permanenten Dipolmoment besitzen ein Rotationsspektrum.

Allgemein gilt ferner, dass für einen photoneninduzierten Übergang ausgehend von einem Photon der Energie $E = h\nu$ die Resonanzbedingung :

$$E_n - E_m \approx h\nu \quad (1)$$

gelten muss. Also die eingestrahlte Energie der Energiedifferenz der betreffenden diskreten Zustände entspricht, um den Übergang vom Zustand n in den Zustand m zu ermöglichen.

Betrachtet wir nun die Rotationsspektroskopie, ergibt sich durch das Modell des starren Rotators eine Diskretion dieser Energiewerte in der Einheit $[cm^{-1}]$ gemäß :

$$\frac{E(J)}{hc} = F(J) = BJ(J+1) \quad \text{wobei: } B = \frac{h}{8\pi^2 cI} \quad (2)$$

Die Auswahlregel für Rotationsspektren lautet $\Delta J = \pm 1$ und ergibt sich aus der bereits vorgestellten quantenmechanischen Beschreibung. Umformen des Energietherms $F(J)$ unter Berücksichtigung der Auswahlregel führt zu der allgemeinen Wellenzahl eines Rotationsüberganges als:

$$\tilde{\nu} = 2B(J+1) \quad (3)$$

Mit diesen Informationen haben wir eine Möglichkeit einen direkte Zusammenhang von makroskopischen Größen wie experimentellen Messungen, zu einer mikroskopischen Größe in Form des Trägheitsmoments, ferner den Bindungsabstand bei bekannten Atommassen, zu erhalten.

Für die Schwingungsspektroskopie kann in Analogie zum Vorgehen bei der Rotationsspektroskopie durch das Modell des harmonischen bzw. anharmonischen Oszillators Energietherme, Auswahlregeln und Korrelare zwischen makroskopischen Messgrößen und mikroskopischer Eigenschaft des betreffenden Systems, gefunden werden. So ergibt sich im Fall des anharmonischen Oszillators, der die Realität einer chemischen Bindung gut approximiert, Energietherme als :

$$\frac{E(v)}{h} = G(v) = \tilde{\nu}_e(v + \frac{1}{2}) - \tilde{\nu}_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 \quad (4)$$

wobei x_e als Koeffizient des quadratischen Terms die Anharmonizitätskonstante beschreibt. Die Auswahlregeln lauten $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Die Differenz zweier Energiewerte ist durch den quadratischen Term nicht mehr konstant, sondern :

$$\Delta G = G(v') - G(v'') = \tilde{\nu}_e[1 - 2x_e(v + 1)] \quad (5)$$

Wird nun die Differenz nach der Quantenzahl v abgeleitet, folgt eine Konstante als Differenz der Differenzen gemäß :

$$\Delta \Delta G = -\tilde{\nu}_e x_e \quad (6)$$

Insbesondere Gleichung 6 ermöglicht uns den zuvor angesprochenen Zusammenhang zwischen makroskopischer und mikroskopischer Welt. Durch eine weitere Überlegung bezüglich der Dissoziation können somit wichtige, zum Teil nicht messbare, Parameter eines Moleküls bestimmt werden. Über geschickte Extrapolation kann die messbare Dissoziationsenergie D_0 unter Berücksichtigung von v_m als maximale Anzahl von Schwingungszuständen vor der Dissoziation durch :

$$D_0 = \sum_0^{v_m-1} \tilde{\nu}_e[1 - 2x_e(v + 1)] = \frac{\tilde{\nu}_e}{4x_e} - \frac{1}{2}\tilde{\nu}_e \quad (7)$$

berechnet werden. Ferner ergibt sich die nicht messbare Größe der Dissoziation aus dem absoluten Minimum der Morsefunktion, also im Gleichgewichtsabstand D_e als :

$$D_e = \frac{\tilde{\nu}_e}{4x_e} - \frac{1}{4}\tilde{\nu}_e x_e \approx \frac{\tilde{\nu}_e}{4x_e} \quad (8)$$

Betrachten wir nun die Energie eines zweiatomigen Moleküls in Abhängigkeit des Bindungsabstandes, so kann durch den hinreichend bekannten funktionalen Ausdruck des Morsepotentials :

$$V(r) = D_e[1 - e^{-\beta(r-r_e)}]^2 \quad \text{wobei: } \beta = \sqrt{\frac{2\pi^2 c \mu}{D_e h}} \quad (9)$$

die Energie im Molekül angenähert beschrieben werden. Die uns experimentell zugänglichen Größen helfen uns eine solche Funktion idealer zu modellieren, und ferner die Eigenschaften des Systems tiefergreifender zu verstehen. Ebenfalls lassen sich somit Theorien entwickeln und validieren, um experimentelle Größen von nicht Modellsystemen vorherzusagen, was eine Einschätzbarkeit von Experimenten impliziert.

3 Durchführung

Die aus Versuch S1 gewonnenen Daten, der Berechnungen der Energien von Chlorwasserstoff und Kohlenmonoxid in Abhängigkeit von dem Abstand der Kerne wurden nun mittels Igor Pro ausgewertet. Sie entstanden aus der Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung mithilfe des Programms -Gaussian- unter Verwendung der Born-Oppenheimer-Näherung mit den Methoden B3LYP und CCSD. Hierfür wurden die Daten eingelesen, in die Einheiten Hartee und Centimeter umgerechnet, da diese in der Spektroskopie üblich sind. Die Energie wurde gegen den Abstand der Kerne aufgetragen und nahe dem Minimum mit der Morsefunktion durch Igor Pro intrapoliert. Durch die Vorgabe eines Sinnvollen Bereiches in dem die Werte liegen wurde es dem Programm erleichtert die Parameter an die Daten anzupassen. Hierbei wurden die Rotationskonstanten und die Anharmonizität unter Verwendung der Massen und der Gleichgewichtsabstände erhalten, woraus die Rotationsschwingungsspektren bei unterschiedlichen Temperaturen (0.01 K, 1 K, 10 K, 100 K, 1000 K) simuliert werden konnten.

4 Auswertung

Die aus dem Versuch S1 erhaltenen Daten wurden in Abbildung 4.1 für HCl und in Abbildung 4.2 für CO graphisch dargestellt. Der mittels Igor Pro ausgegebene Fit, sowie die dadurch erhaltenen Koeffizienten der Morsefunktion sind ebenfalls in den Abbildungen zu erkennen.

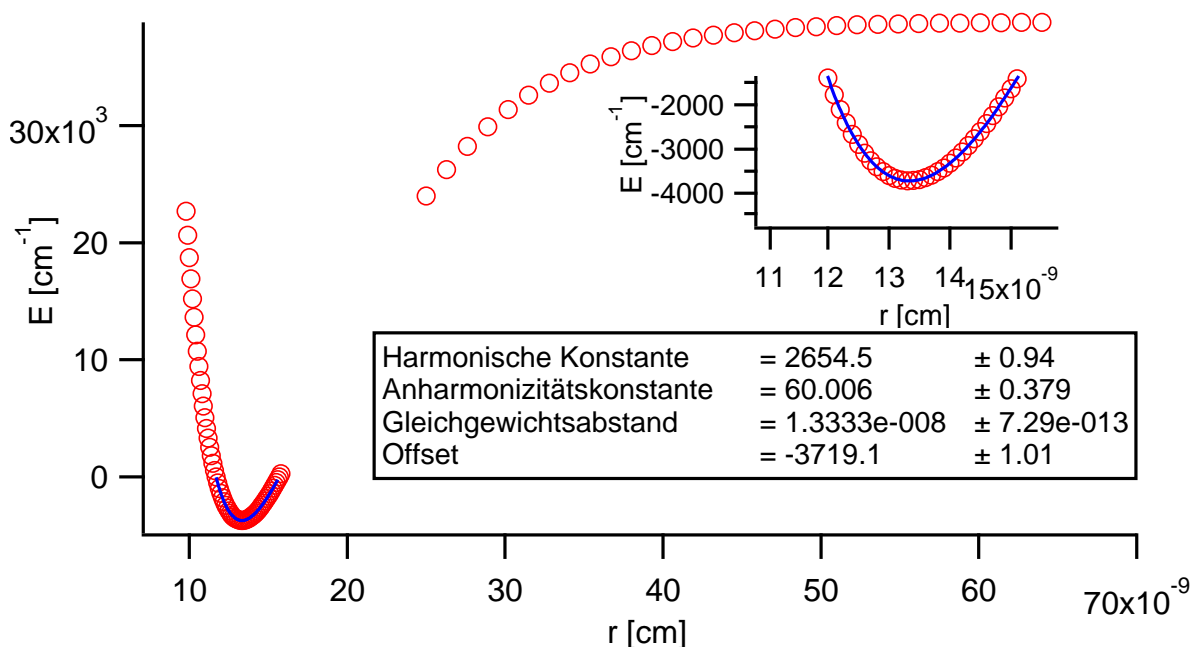


Abbildung 4.1: mit IgorPro gemacht. HCL über morsefit

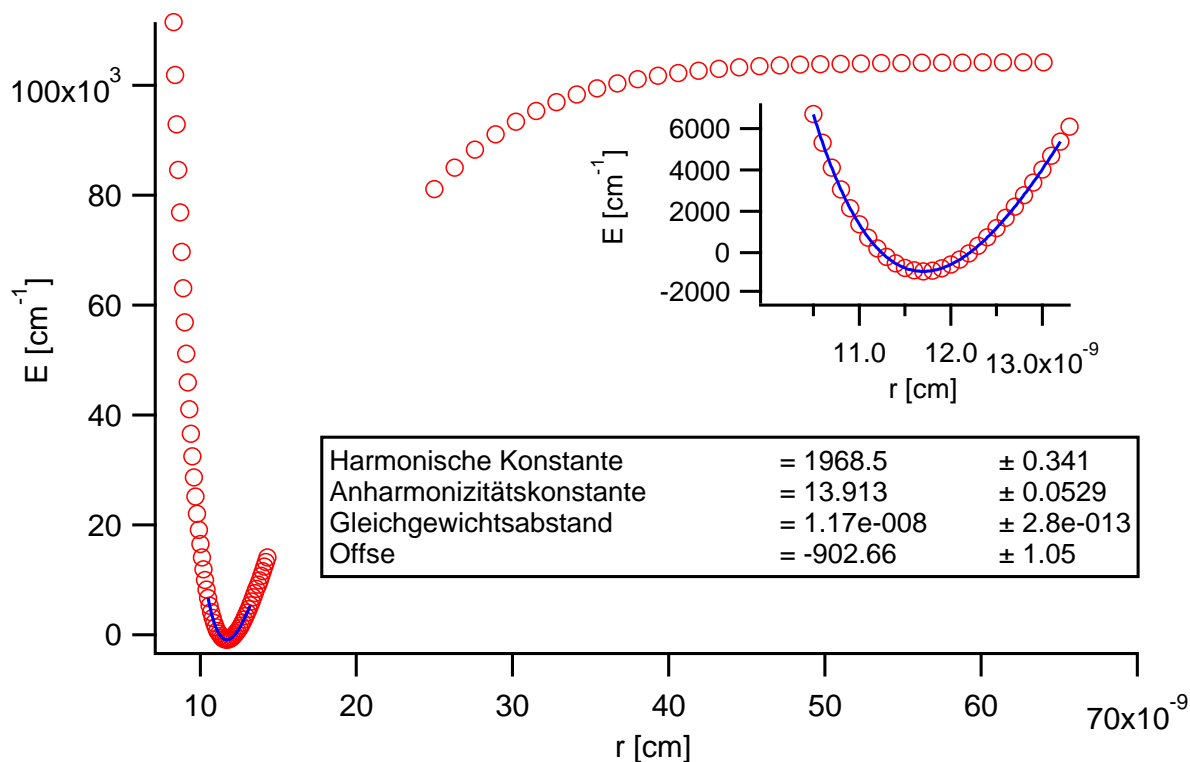


Abbildung 4.2: mit IgorPro gemacht. CO über morsefit

Mittels den erhaltenen Koeffizienten war es nun möglich die theoretische Dissoziationsenergie, sowie die Rotationskonstante B zu berechnen. Die berechneten Werte wurden neben den aus dem Fit erhaltenen Koeffizienten in Tabelle 4.1 zusammengetragen und den Literaturdaten im Vergleich gegenübergestellt.

Tabelle 4.1: Für CO und HCl erhaltene Koeffizienten aus dem Fit der Morsefunktion sowie die berechneten Rotationskonstanten und Dissoziationsenergien.

Molekül		Wert	Absoluter Fehler	Literatur ^[Lit]
CO	$\tilde{\nu}_e$	1968.5 cm ⁻¹	0.35 cm ⁻¹	2169 cm ⁻¹
CO	$\tilde{\nu}_e x_e$	13.91 cm ⁻¹	0.05 cm ⁻¹	13.288 31 cm ⁻¹
CO	r_e	11.7000 · 10 ⁻⁹ cm	0.0003 · 10 ⁻⁹ cm	11.283 23 · 10 ⁻⁹ cm
CO	D_e			
CO	B	2 cm ⁻¹	1 cm ⁻¹	1.931 280 87 cm ⁻¹
HCl	$\tilde{\nu}_e$	2654 cm ⁻¹	1 cm ⁻¹	2990.946 cm ⁻¹
HCl	$\tilde{\nu}_e x_e$	60.0 cm ⁻¹	0.5 cm ⁻¹	52.8186 cm ⁻¹
HCl	r_e	13.3333 · 10 ⁻⁹ cm	0.0008 · 10 ⁻⁹ cm	12.7455 · 10 ⁻⁸ cm
HCl	D_e			
HCl	B	13.00 cm ⁻¹	7.5 cm ⁻¹	10.593 41 cm ⁻¹

4.1 Berechnung der Dissoziationsenergie

Die Dissoziationsenergie ermittelt sich gemäß Gleichung 10

$$D_e \approx \frac{\tilde{\nu}_e^2}{4\tilde{\nu}_e x_e} \quad (10)$$

Der absolute Fehler berechnet sich nach Gleichung 11.

$$\Delta D_e = \left| \frac{\delta D_e}{\delta \tilde{\nu}_e} \right| \cdot \Delta \tilde{\nu}_e + \left| \frac{\delta D_e}{\delta \tilde{\nu}_e x_e} \right| \cdot \Delta \tilde{\nu}_e x_e \quad (11)$$

Somit gilt für die Dissoziationsenergie für CO nach Gleichung 12.

$$D_e \approx \frac{2654.5^2}{4 \cdot 60.006} \text{ cm}^{-1} \approx 29\,356.94 \text{ cm}^{-1} \quad (12)$$

sowie deren absoluten Fehler nach Gleichung

4.2 Berechnung der Rotationskonstante B

Allgemeines Vorgehen

Die Rotationskonstante B , sowie der Fehler ΔB berechnen sich gemäß der Gleichungen 13 und 14.

$$B = \frac{\hbar}{4 \cdot \pi \cdot c \cdot \mu \cdot r_e^2} = konst. \cdot \frac{1}{\mu \cdot r_e^2} \quad (13)$$

$$\Delta B = \left| \frac{\delta B}{\delta r_e} \right| \cdot \Delta r_e = konst. \cdot \left| \frac{-2}{\mu \cdot r_e^3} \right| \cdot \Delta r_e \quad (14)$$

Dabei werden zur Vereinfachung die Naturkonstante in einer Konstante $konst.$ in Gleichung 15 zusammengefasst.

$$konst. = \frac{1.054\,571\,800 \cdot 10^{-34} \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-1}}{4 \cdot 3.14159265359 \cdot 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}} = 2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m} \quad (15)$$

Berechnung für HCl

Für HCl ergibt sich somit, unter Verwendung des durch den Fit ausgegeben Gleichgewichtsabstandes r_e und dem dazugehörigen absoluten Fehler Δr_e

$$r_e = 1.3333 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 1.3333 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (16)$$

$$\Delta r_e = 7.29 \cdot 10^{-13} \text{ cm} = 7.29 \cdot 10^{-13} \text{ m} \quad (17)$$

„sowie der in Gleichung 18 berechneten reduzierten Masse μ

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{m(H) \cdot m(Cl)}{m(H) + m(Cl)} \\ \mu &= \frac{1 \cdot 35}{1 + 35} \text{ u} = \frac{35}{36} \text{ u} = 1.614\,412\,705 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \end{aligned} \quad (18)$$

die in Gleichung 19 berechnete Rotationskonstante B

$$B = \frac{2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m}}{1.614\,412\,705 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot 1.3333 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2} = 1300.478\,182 \text{ m}^{-1} = 13 \text{ cm}^{-1} \quad (19)$$

„sowie der absolute Fehler ΔB gemäß Gleichung 20.

$$\begin{aligned} \Delta B &= \left| -2 \cdot \frac{2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m}}{1.614\,412\,705 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot 1.3333 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3} \right| \cdot 7.29 \cdot 10^{-15} \text{ m} \\ &= 0.072\,826\,678\,18 \text{ m} = 7.5 \text{ cm} \end{aligned} \quad (20)$$

Berechnung für CO

Für CO ergibt sich somit, unter Verwendung des durch den Fit ausgegeben Gleichgewichtsabstandes r_e und dem dazugehörigen absoluten Fehler Δr_e

$$r_e = 1.17 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 1.17 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (21)$$

$$\Delta r_e = 2.8 \cdot 10^{-13} \text{ cm} = 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (22)$$

sowie der in Gleichung 23 berechneten reduzierten Masse μ

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{m(H) \cdot m(Cl)}{m(H) + m(Cl)} \\ \mu &= \frac{12 \cdot 16}{12 + 16} \text{ u} = \frac{48}{7} \text{ u} = 1.138\,655\,165 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \end{aligned} \quad (23)$$

die in Gleichung 24 berechnete Rotationskonstante B

$$B = \frac{2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m}}{1.136\,551\,65 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \cdot 1.17 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2} = 210.50 \text{ m}^{-1} = 2 \text{ cm}^{-1} \quad (24)$$

„sowie der absolute Fehler ΔB gemäß der Gleichung 25.

$$\begin{aligned} \Delta B &= \left| -2 \cdot \frac{2.799\,274\,682 \cdot 10^{-44} \text{ kg m}}{1.136\,551\,65 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \cdot 1.17 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3} \right| \cdot 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m} \\ &= 0.011\,788\,498\,83 \text{ m} = 1 \text{ cm} \end{aligned} \quad (25)$$

4.3 Rotationsschwingungsspektren bei verschiedenen Temperaturen

Die erhaltene Rotationskonstante B sowie die harmonische Konstante $\tilde{\nu}_e$ und die Anharmonizitätskonstante $\tilde{\nu}_e x_e$ wurden verwendet um das theoretische Aussehen der Rotationsschwingungsspektren von CO in Abbildung 4.3 bis Abbildung 4.7 und für HCl in Abbildung 4.8 bis Abbildung 4.12 bei 1000 K, 100 K, 10 K, 1 K und 0.01 K vorherzusagen.

Sowohl bei CO als auch HCl kann in den Abbildungen 4.3 und 4.8 beobachtet werden, dass bei einer Temperatur von 1000 K auch eine große Zahl von Signalen gefunden werden können. Dies kann auf den Zusammenhang der Intensitäten der verschiedenen Rotationsniveaus aus der Boltzmann-Verteilung in Gleichung ?? zurückgeführt werden. Mit fallender Temperatur verdünnen sich daher die Spektren in Abbildung 4.4 und 4.5 für CO bzw. 4.9 und 4.10 für HCl bei 100 und 10 K, bis schließlich bei einer Temperaturen nahe 0 K in Abbildung 4.7 bei CO bzw. 4.12 bei HCl nur noch ein einzelnes Signal beobachtet werden kann. Dieses Signal zeigt den Schwingungsübergang gemäß der Gleichung ?? mit einem Rotationsübergang von $J = 0$ hin zu $J' = 1$, also das erste zu beobachtende Signal im Q-Zweig. Obwohl die Auswahlregel für Rotationsübergänge ($\Delta J = \pm 1$) auf zwei mögliche Signale hindeutet, ist im Falle von $J = 0$ ein Übergang in den R-Zweig nicht zu beobachten, da dies bedeuten würde, dass ein Übergang hin zu $J' = -1$ stattfinden müsste.

Theoretische Spektren für CO

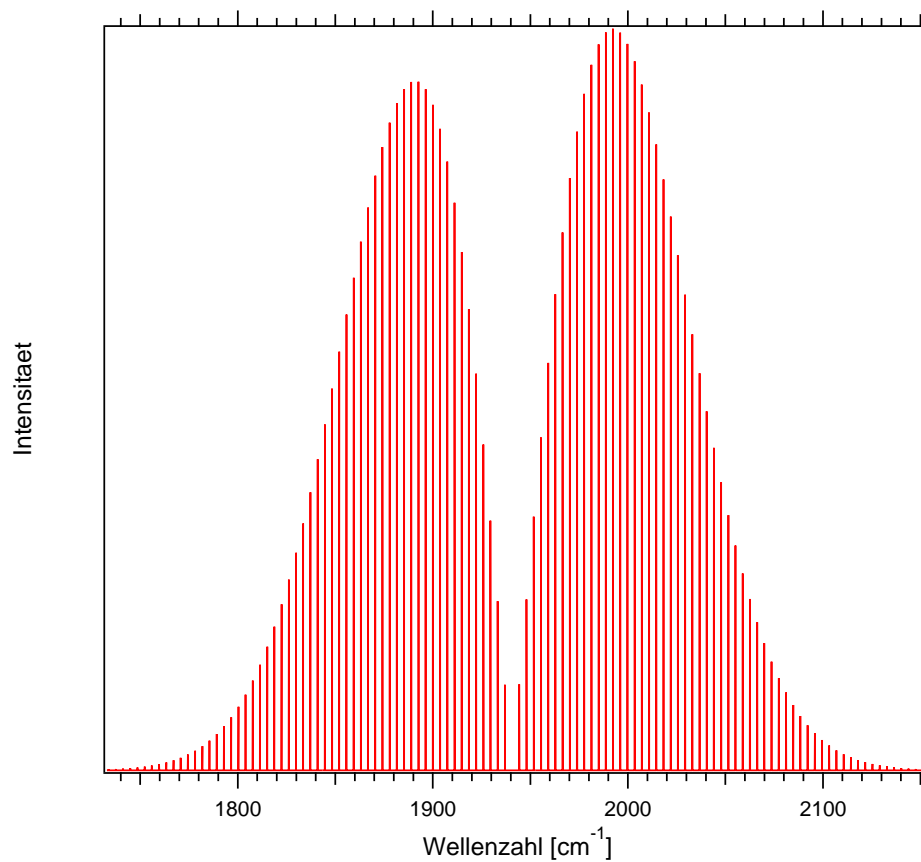


Abbildung 4.3: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1000 K

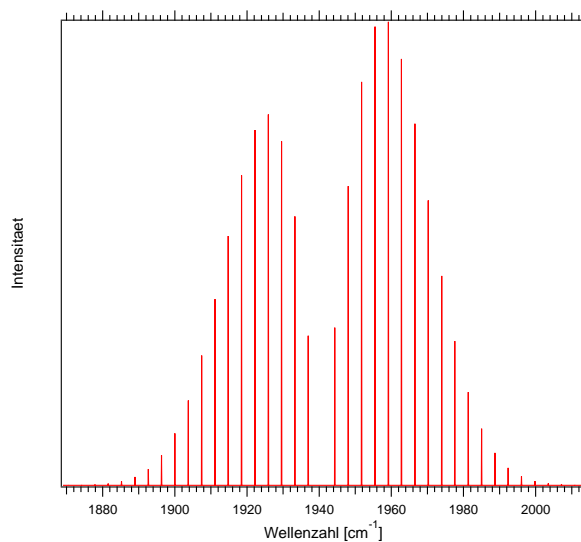


Abbildung 4.4: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 100 Kelvin

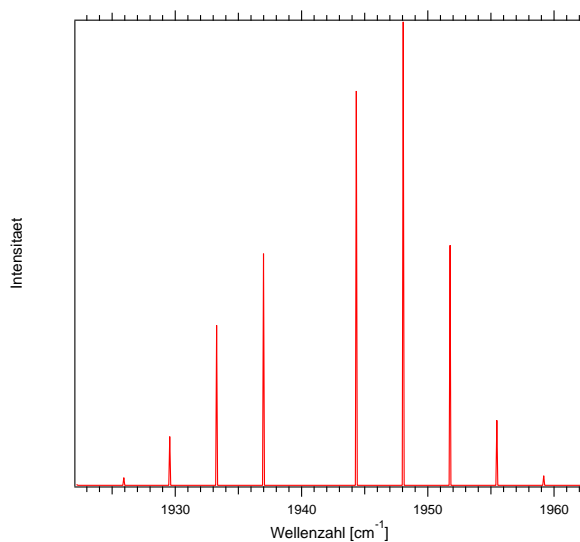


Abbildung 4.5: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 Kelvin

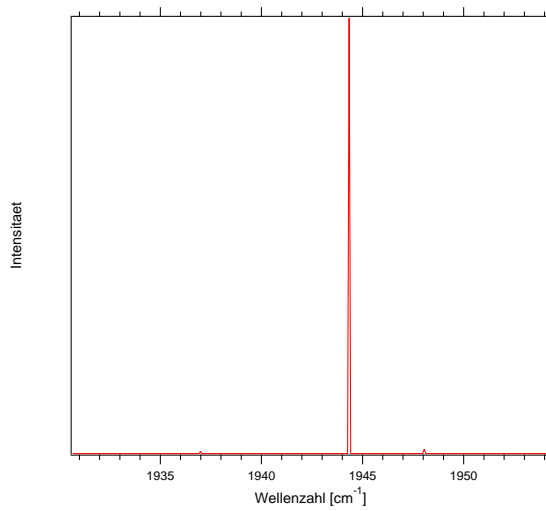


Abbildung 4.6: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1 K

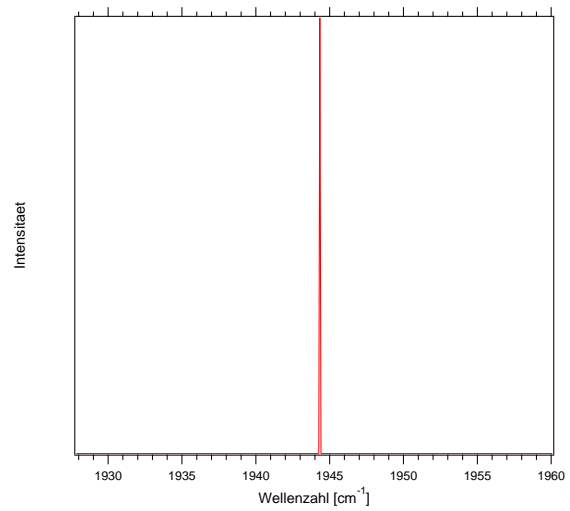


Abbildung 4.7: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 0.01 K

Theoretische Spektren für HCl

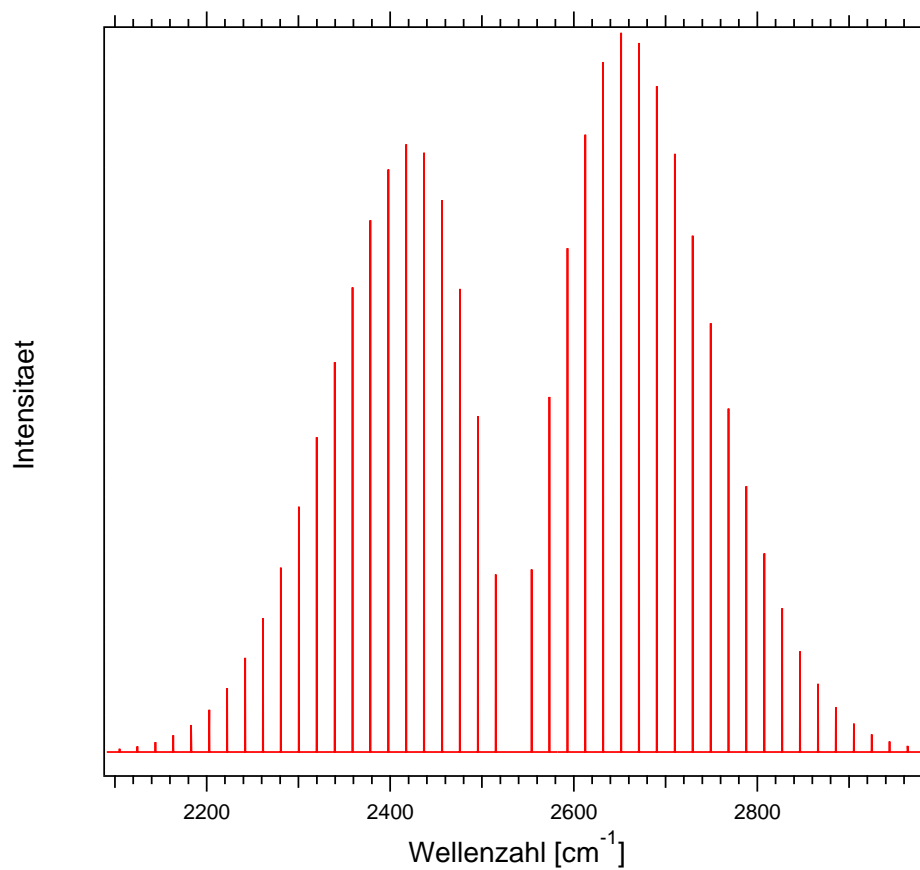


Abbildung 4.8: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1000 K

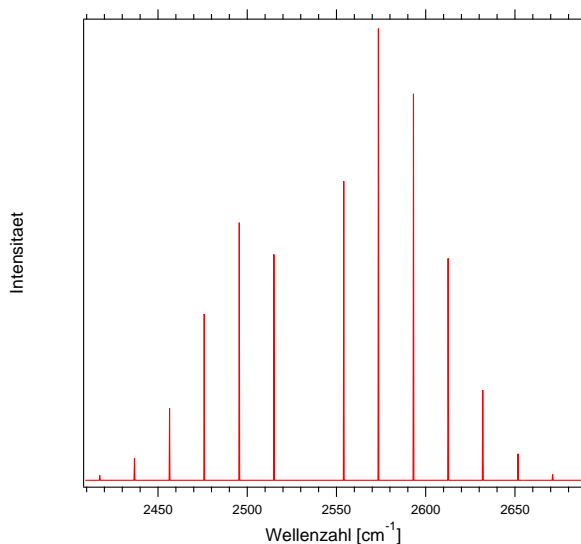


Abbildung 4.9: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 100 Kelvin

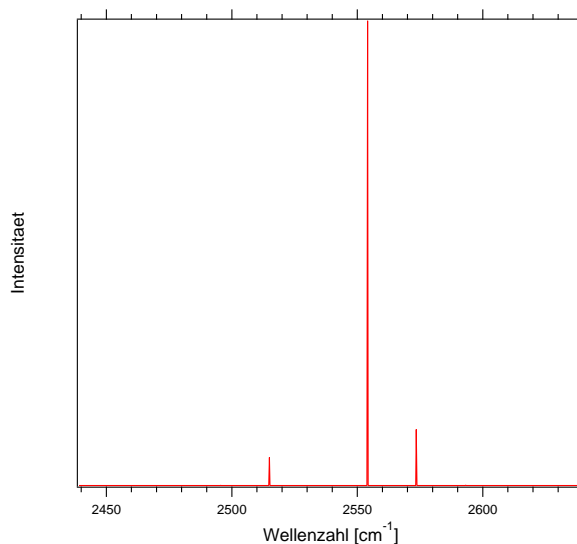


Abbildung 4.10: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 10 Kelvin

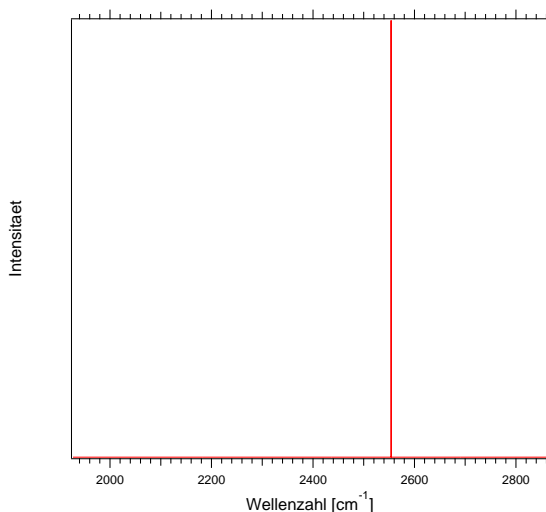


Abbildung 4.11: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 1 K

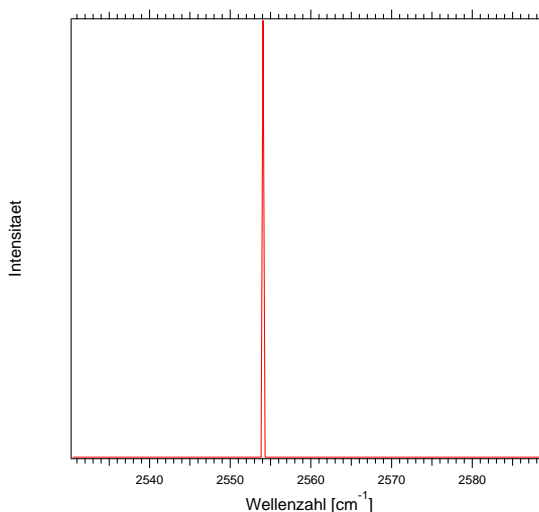


Abbildung 4.12: berechnetes Rotationsschwingungsspektrum bei 0.01 K

5 Zusammenfassung

Durch die Anpassung der in Versuch S1 erhaltenen Werte im Minimum mit der Morsefunktion wurden für CO und HCl die harmonische Konstante, die Anharmonizitätskonstante, der Gleichgewichtsabstand, die Dissoziationsenergie und die Rotationskonstante wie in Tabelle 4.1 dargestellt berechnet. Die erhaltenen Werte stimmen in guter Näherung mit den Literaturwerten überein. Sämtliche Werte von CO liegen wie erwartet unter den jeweiligen Werten HCl. Dies spiegelt sich auch in den simulierten Spektren wider. So liegt die Lücke von CO bei 1000 Kelvin bei rund 1940 inversen Centimetern, wohingegen sie bei HCl bei über 2500 liegt. Je höher die Temperatur in der Simulation gewählt wurde, desto höher mehr Linien und somit mehr Übergänge sind erkennbar.

6 Rohdaten

Tabelle 6.1: Rohdaten der Energien nach Born Oppenheimer Näherung für verschiedene Bindungsabstände berechnet über GAUSSIAN für HCl und CO mit der Methode B3LYP und dem Basissatz 6-31G

B3LYP Werte für HCL		B3LYP Werte für CO	
Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hatree	Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hartree
0.83	-112.7369	0.98	-460.63329
0.84	-112.78074	0.99	-460.64262
0.85	-112.82153	1.0	-460.65139
0.86	-112.85945	1.01	-460.65961
0.87	-112.89468	1.02	-460.66733
0.88	-112.92737	1.03	-460.67456
0.89	-112.95769	1.04	-460.68134
0.9	-112.98577	1.05	-460.68768
0.91	-113.01175	1.06	-460.6936
0.92	-113.03576	1.07	-460.69913
0.93	-113.05792	1.08	-460.70429
0.94	-113.07834	1.09	-460.70909
0.95	-113.09713	1.1	-460.71356
0.96	-113.11438	1.11	-460.7177
0.97	-113.1302	1.12	-460.72154
0.98	-113.14466	1.13	-460.72509
0.99	-113.15786	1.14	-460.72836
1.0	-113.16986	1.15	-460.73137
1.01	-113.18075	1.16	-460.73414
1.02	-113.1906	1.17	-460.73667
1.03	-113.19946	1.18	-460.73898
1.04	-113.2074	1.19	-460.74109
1.05	-113.21448	1.2	-460.74299
1.06	-113.22075	1.21	-460.7447
1.07	-113.22626	1.22	-460.74623
1.08	-113.23107	1.23	-460.74759
1.09	-113.23521	1.24	-460.74878
1.1	-113.23873	1.25	-460.74983
1.11	-113.24167	1.26	-460.75072
1.12	-113.24406	1.27	-460.75148
1.13	-113.24595	1.28	-460.75211
1.14	-113.24737	1.29	-460.75262
1.15	-113.24835	1.3	-460.75301
1.16	-113.24891	1.31	-460.75329
1.17	-113.2491	1.32	-460.75347
1.18	-113.24892	1.33	-460.75355
1.19	-113.24841	1.34	-460.75353
1.2	-113.24759	1.35	-460.75343
1.21	-113.24649	1.36	-460.75324
1.22	-113.24512	1.37	-460.75298

B3LYP Werte für HCL		B3LYP Werte für CO	
Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hatree	Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hartree
1.23	-113.2435	1.38	-460.75263
1.24	-113.24165	1.39	-460.75222
1.25	-113.23959	1.4	-460.75174
1.26	-113.23734	1.41	-460.7512
1.27	-113.2349	1.42	-460.7506
1.28	-113.2323	1.43	-460.74995
1.29	-113.22955	1.44	-460.74924
1.3	-113.22666	1.45	-460.74849
1.31	-113.22363	1.46	-460.74769
1.32	-113.2205	1.47	-460.74685
1.33	-113.21725	1.48	-460.74596
1.34	-113.21391	1.49	-460.74504
1.35	-113.21048	1.5	-460.74409
1.36	-113.20696	1.51	-460.74309
1.37	-113.20338	1.52	-460.74207
1.38	-113.19974	1.53	-460.74101
1.39	-113.19603	1.54	-460.73993
1.4	-113.19228	1.55	-460.73883
1.41	-113.18848	1.56	-460.73769
1.42	-113.18465	1.57	-460.73654
1.43	-113.18078	1.58	-460.73537
2.5	-112.87545	2.5	-460.62736
2.63	-112.85758	2.63	-460.61709
2.76	-112.84261	2.76	-460.60812
2.89	-112.83006	2.89	-460.6004
3.02	-112.81951	3.02	-460.59381
3.15	-112.81066	3.15	-460.5882
3.28	-112.80324	3.28	-460.58345
3.41	-112.79705	3.41	-460.57944
3.54	-112.79191	3.54	-460.57606
3.67	-112.78767	3.67	-460.57323
3.8	-112.78418	3.8	-460.57086
3.93	-112.78133	3.93	-460.56888
4.06	-112.77902	4.06	-460.56724
4.19	-112.77715	4.19	-460.56587
4.32	-112.77565	4.32	-460.56474
4.45	-112.77446	4.45	-460.56381
4.58	-112.77352	4.58	-460.56304
4.71	-112.77279	4.71	-460.5624
4.84	-112.77221	4.84	-460.56189
4.97	-112.77177	4.97	-460.56146
5.1	-112.77143	5.1	-460.56112
5.23	-112.77116	5.23	-460.56083
5.36	-112.77095	5.36	-460.5606
5.49	-112.77079	5.49	-460.56042

B3LYP Werte für HCL		B3LYP Werte für CO	
Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hatree	Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hartree
5.62	-112.77066	5.62	-460.56028
5.75	-112.77055	5.75	-460.56016
5.88	-112.77046	5.88	-460.56006
6.01	-112.77039	6.01	-460.55998
6.14	-112.77032	6.14	-460.55991
6.27	-112.77026	6.27	-460.55986
6.4	-112.7702	6.4	-460.55982