

Fortgeschrittenes physikalisches Praktikum

Wintersemester 2021/2022

Versuch Raman-Spektroskopie

Raman-Effekt

Gruppe: 6
Versuchstag: 27.09.2021
Betreuer: Daniel Zapf

Anna-Maria Pleyer · Dominik Müller



Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	5
2 Versuchsdurchführung	6
3 Auswertung	8
3.1 Wie groß ist der Offset des Monochromators	8
3.2 Ramanwellenzahlen	9
3.2.1 Bestimmung der Ramanwellenzahlen	9
3.2.2 Messwerte und Vergleich mit der Literatur	10
3.3 Depolarisationsgrad	13
3.3.1 Off-Set des Monochromators	13
3.3.2 Berechnung des Depolarisationsgrad	14
3.4 Lage der Raman-Linien aller Moleküle	17
3.5 Zuordnung der Molekülschwingungen zu den Ramanlinien & Diskussion	19
3.5.1 Vorwissen	19
3.5.2 Zuordnung von Molekülschwingungen zu den gemessenen Linien	20
3.6 Vergleich der Verhältnisse der gemessenen Schwingungsfrequenzen mit theoretisch zu erwartenden Werten	22
4 Fazit	24
A Messprotokoll	25
B Gemessene Plots	33
B.1 Tetrachlormethan	33
B.2 Chlorophorm	34
B.3 Deuterium Chlorophorm	35
B.4 Bromophorm	36
C Peaks für den Depolarisationsgrad	37
D Werte für Lage der Raman-Linien	39
Literaturverzeichnis	41

1 Einleitung

Der Raman-Effekt wurde bereits 1923 vorhergesagt und schließlich 1928 von C. V. Raman nachgewiesen. Als Raman-Streuung wird die unelastische Streuung von Licht an Molekülen oder Festkörpern bezeichnet. Bei einem Zusammenstoß von Licht (Photon) und Molekül kommt es zu einer Energieübertragung, diese kann sowohl vom Photon auf das Molekül stattfinden als auch vom Molekül auf das Photon. Den ersten Vorgang bezeichnet man auch als *Stokes-Streuung*, während der zweite *Anti-Stokes-Streuung* genannt wird. Je nachdem welcher Prozess stattfindet, besitzt das Photon eine höhere oder niedrigere Frequenz als das einfallende Licht. Diese Frequenzdifferenz ist spezifisch für die einzelnen zu untersuchenden Moleküle oder Atome. Mithilfe der Raman-Spektroskopie können Raman-Spektren aufgenommen werden und durch diese damit sichtbaren charakteristische Frequenzunterschiede können Rückschlüsse auf das bestrahlte Molekül gezogen werden. Im aufgenommenen Spektrum sind jedoch nicht nur die Frequenzunterschiede des Raman-Effekts sichtbar, sondern zum größten Teil (bis zu 1000-mal wahrscheinlicher) auch die Frequenz des eingestrahlten Lichtes, dies ist die sogenannte *Rayleigh-Streuung*.

Ziel unseres Versuches ist es, dass man am Beispiel von einfachen fünfatomigen Molekülen Raman Spektren aufnimmt und anschließend die Moleküle auf ihre Symmetrie, atomaren Aufbau und deren Strukturen untersucht. Es werden die frequenzverschobenen Streuspektren der Moleküle Tetrachlormethan (CCl_4), Chloroform ($CHCl_3$), deuteriertem Chloroform ($CDCl_3$) und Bromoform ($CHBr_3$) betrachtet und deren beobachteten Raman-Linien und zum Teil deren Depolarisationsgrade bestimmt.

2 Versuchsdurchführung

Der Versuch wurde bereits vom Betreuer, nach der Anleitung im Skript, aufgebaut.
Der Versuchstisch sah wie folgt aus:

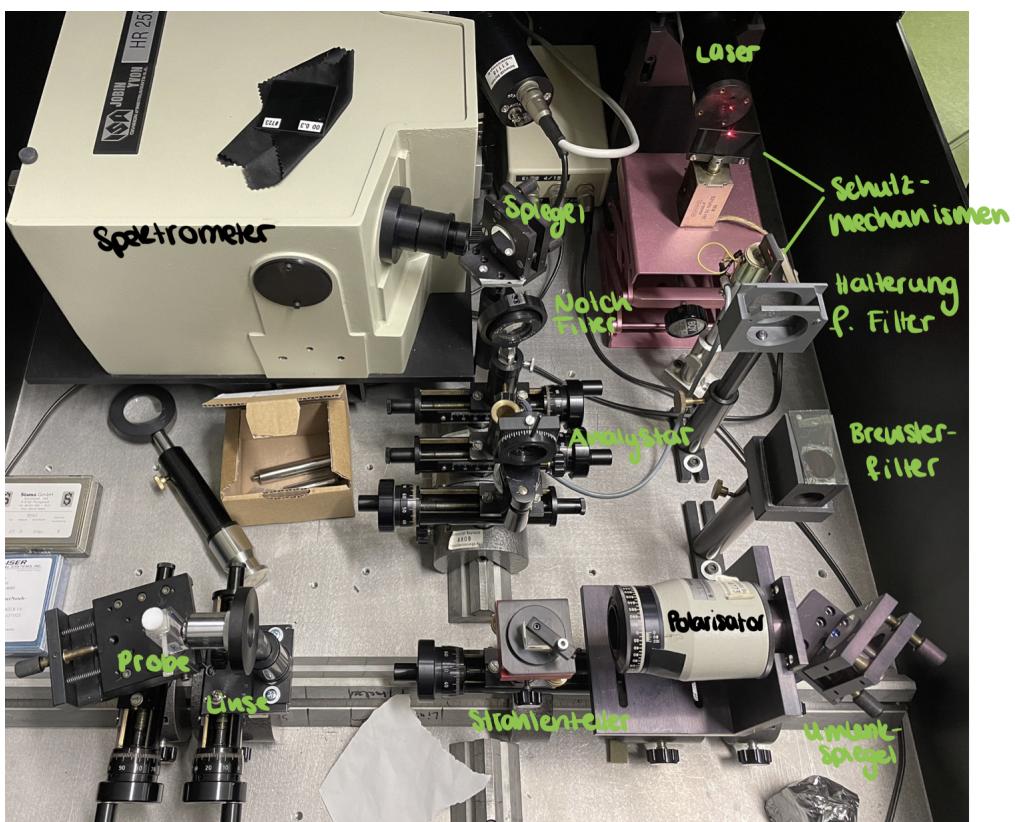


Abbildung 2.1: Versuchsaufbau

Die entsprechend verwendeten Geräte wurden gekennzeichnet. Im Versuch wurde ein Helium-Neon Laser verwendet.

Die einzigen Veränderungen die während dem Versuch am Aufbau vorgenommen wurden, war zum einen die Änderung der Polarisierung, diese variierte jedoch nur zwischen 0° bzw. 90° und zum anderen der Wechsel der Proben.

Die erste Probe war $CDCl_3$, diese wurde, wie auch die folgenden drei, zuerst in den Probenhalter eingesetzt und anschließend mit einer Plastik-Schraube fixiert. Danach wurde der Probenbehälter an die Linse herangefahren, dies geschah sehr langsam und vorsichtig.

Die Reihenfolge und die Messbereiche, sowie die gemessenen Peaks sind dem, im Anhang befindlichen, Protokoll zu entnehmen.

Während dem Versuch wurden die gerade angesprochenen Peaks der Raman-Linien bestimmt. Die folgende Graphik soll veranschaulichen, wie diese bestimmt wurden.

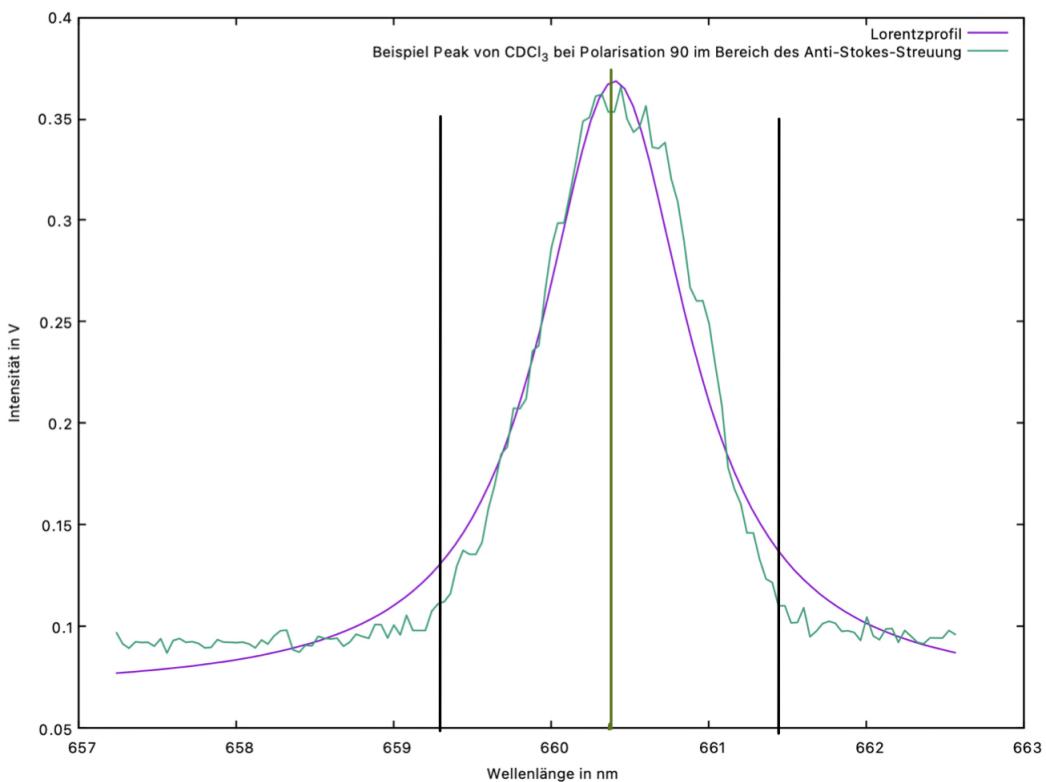


Abbildung 2.2: Skizze der Intensitätsbestimmung der Peaks während dem Versuch, am Beispiel von einem Peak von $CDCl_3$ bei einer Polarisation von 90° im Anti-Stokes-Bereich mit eingezeichneten Lorentzprofil des entsprechenden Peaks.

Während der Messung wurde die Breite des Peaks bestimmt, in der Abbildung 2.2 als schwarze Linien gekennzeichnet, und anschließend die ungefähre Mitte geschätzt, dies ist in der Abbildung mithilfe der grünen Linien veranschaulicht wurden. In der Mitte wurde die Peak-Intensität, mithilfe des Cursors herausgelesen, hierbei wurde darauf geachtet, dass es sich nicht um ein Minimum bzw. Maximum des 'Rausches' handelte, sondern um einen ungefähren Peak des im Kopf abgeschätzten Lorentzprofils. In Abbildung 2.2 wurde zur Veranschaulichung das Lorentzprofil (lila) des Beispiel-Peaks eingezeichnet. Diese wurde jedoch nicht bei jedem Peak berücksichtigt, sondern wie gerade schon erwähnt im Kopf abgeschätzt.

Das hat natürlich zur Folge, dass die Intensitätsbestimmung der Peaks einen hohen Fehler haben.

3 Auswertung

3.1 Wie groß ist der Offset des Monochromators

Der Monochromator besitzt einen Offset der gemessenen Wellenlänge zu der realen Wellenlänge. Dieser wird korrigiert, indem die Rayleigh-Wellenlänge auf die Wellenlänge des Lasers korrigiert wird. Beispielweise wurde bei CCl_4 (Stokes, 0° Polarisation) die Rayleigh Wellenlänge bei 632,4 nm gemessen. Der Offset zur Laserwellenlänge ($\lambda_L = 632,8 \text{ nm}$) beträgt: $\lambda_{off} = 0,4 \text{ nm}$.

Folgende Offsets ergeben sich für alle Messungen:

(a) 0° Polarisation			(b) 90° Polarisation		
Molekül	Stokes	Anti-Stokes	Molekül	Stokes	Anti-Stokes
CCl_4	0,4	0,3	CCl_4	0,5	0,6
$CHCl_3$	0,4	0,4	$CHCl_3$	0,6	0,6
$CDCl_3$	0,4	0,4	$CDCl_3$	0,6	0,6
$CHBr_3$	0,4	0,4	$CHBr_3$	0,6	0,5

Tabelle 3.1: Monochromator-Offset in (nm)

Diese Werte, werden nun zu den entsprechenden Messungen hinzugefügt.

3.2 Ramanwellenzahlen

3.2.1 Bestimmung der Ramanwellenzahlen

Bereits während des Versuches, wurden die Wellenlängen der einzelnen Peak bestimmt. Die kompletten aufgenommenen Spektren sind nochmal im Anhang zu finden. Dabei wurde darauf geachtet, dass für die Wellenlängenbestimmung der 'Cursor' mittig in der Flanke war. Die gemessenen Wellenlängen lassen sich in Wellenzahlen wie folgt umrechnen:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{100 \cdot \lambda} \quad (3.1)$$

Um nun die Raman-Verschiebung zu berechnen, wird die Wellenzahl der Rayleigh Linie von der der (Anti-)Stokes-Linie abgezogen:

$$\Delta\tilde{\nu} = |\tilde{\nu}_{\text{Raman}} - \tilde{\nu}_{\text{Rayleigh}}| \quad (3.2)$$

Als Fehler wurde ein Ablesefehler von $0,2 \text{ nm}$ veranschlagt. Für den Fehler von der Ramanverschiebung folgt:

$$\Delta\tilde{\nu} = \left| 0,2 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot \frac{1}{100 \cdot (\lambda_{\text{Raman}})^2} \right| \quad (3.3)$$

Der Fehler für die kleinsten gemessenen Wellenlängen liegt bei $6,4 \text{ cm}^{-1}$ und für die größten bei $4,2 \text{ cm}^{-1}$. Somit wird als Abschätzung nach oben, ein Fehler von $6,4 \text{ cm}^{-1}$ verwendet.

3 Auswertung

3.2.2 Messwerte und Vergleich mit der Literatur

Bei der Benennung, steht der erste Index für den Stokes (s)/Anti-Stokes (as) Bereich und der zweite Index für die Polarisation. Die Literaturangaben, wurden aus dem Auszug des Buches 'Molecular spectra & and molecular structure' aus der Zusatzliteratur entnommen (Herzberg, 1945).

CCl_4

Folgende Wellenzahlen wurden für Tetrachlormethan bestimmt:

$\tilde{\nu}_{s,0}$ (cm^{-1})	$\tilde{\nu}_{as,0}$ (cm^{-1})	$\tilde{\nu}_{s,90}$ (cm^{-1})	$\tilde{\nu}_{as,90}$ (cm^{-1})	$\tilde{\nu}_l$ (cm^{-1})
(287, 3 \pm 6, 4)	(221, 6 \pm 6, 4)	(210, 0 \pm 6, 4)	(228, 9 \pm 6, 4)	145,0
(305, 5 \pm 6, 4)	(318, 1 \pm 6, 4)	(305, 5 \pm 6, 4)	(327, 7 \pm 6, 4)	217,9
				314,0
				434,0
(463, 0 \pm 6, 4)	(446, 8 \pm 6, 4)	(470, 1 \pm 6, 4)		455,1/458,4/461,5
(776, 5 \pm 6, 4)	(737, 1 \pm 6, 4)	(790, 0 \pm 6, 4)		762,0/790,5
	(888, 9 \pm 6, 4)			
	(933, 6 \pm 6, 4)			
	(1035, 1 \pm 6, 4)			
	(1126, 3 \pm 6, 4)			
	(1212, 7 \pm 6, 4)			
	(1279, 6 \pm 6, 4)			
	(1376, 4 \pm 6, 4)			
	(1540, 3 \pm 6, 4)			1539,0
	(1591, 5 \pm 6, 4)			
	(1679, 7 \pm 6, 4)			
	(1762, 7 \pm 6, 4)			
	(1868, 2 \pm 6, 4)			

Tabelle 3.2: Vergleich der gemessenen Ramanlinien mit Literatur für 0° und 90°-Polarisation im (Anti-)Stokes-Bereich für CCl_4

Speziell zu Tetrachlormethan ist zu sagen, dass in der Literatur mehrere nahe beieinander liegende Wellenzahlen angegeben wurden. Diese konnten wir aber nicht auflösen und haben diese deswegen nur als eine Linie gemessen.

CHCl₃

Folgende Wellenzahlen wurden für Trichlormethan (Chlorophorm) bestimmt:

$\tilde{\nu}_{s,0}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_{as,0}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_{s,90}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_{as,90}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_l$ (cm ⁻¹)
(100, 5 ± 6, 4)		(90, 4 ± 6, 4)	(194, 9 ± 6, 4)	
(256, 3 ± 6, 4)	(270, 0 ± 6, 4)	(248, 6 ± 6, 4)	(274, 8 ± 6, 4)	260,0
(360, 1 ± 6, 4)	(370, 7 ± 6, 4)	(352, 3 ± 6, 4)	(370, 7 ± 6, 4)	365,9
		(537, 1 ± 6, 4)		
	(674, 2 ± 6, 4)	(655, 4 ± 6, 4)	(676, 5 ± 6, 4)	668,3
	(767, 4 ± 6, 4)	(748, 0 ± 6, 4)	(774, 2 ± 6, 4)	761,2
		(911, 2 ± 6, 4)		
		(1026, 6 ± 6, 4)		
		(1126, 3 ± 6, 4)		
(1221, 3 ± 6, 4)	(1209, 8 ± 6, 4)	(1227, 6 ± 6, 4)		1215,6
		(1276, 6 ± 6, 4)		
		(1376, 4 ± 6, 4)		
		(1585, 5 ± 6, 4)		
		(1673, 6 ± 6, 4)		
		(1765, 7 ± 6, 4)		
		(1861, 9 ± 6, 4)		
				3018,9

Tabelle 3.3: Vergleich der gemessenen Ramanlinien mit der Literatur für 0° und 90°-Polarisation im (Anti-)Stokes-Bereich für CHCl₃

CDCl₃

Folgende Wellenzahlen wurden für deuteriertes Trichlormethan (deuteriertes Chlorophorm) bestimmt:

$\tilde{\nu}_{s,0}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_{as,0}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_{s,90}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_{as,90}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_l$ (cm ⁻¹)
(100, 5 ± 6, 4)		(92, 9 ± 6, 4)		
(253, 7 ± 6, 4)	(265, 2 ± 6, 4)	(246, 0 ± 6, 4)	(270, 0 ± 6, 4)	262,0
(357, 5 ± 6, 4)	(368, 3 ± 6, 4)	(352, 3 ± 6, 4)	(373, 1 ± 6, 4)	366,5
		(534, 4 ± 6, 4)		
	(658, 2 ± 6, 4)	(639, 2 ± 6, 4)	(658, 2 ± 6, 4)	650,8
	(744, 8 ± 6, 4)		(747, 1 ± 6, 4)	737,6
		(891, 7 ± 6, 4)		
	(915, 2 ± 6, 4)	(930, 8 ± 6, 4)	(921, 8 ± 6, 4)	908,3
		(1123, 4 ± 6, 4)		
		(1212, 7 ± 6, 4)		
(1218, 5 ± 6, 4)		(1279, 6 ± 6, 4)		
(1379, 3 ± 6, 4)		(1370, 5 ± 6, 4)		
		(1537, 3 ± 6, 4)		
				2250,0

Tabelle 3.4: Vergleich der gemessenen Ramanlinien mit der Literatur für 0° und 90°-Polarisation im (Anti-)Stokes-Bereich für CDCl₃

3 Auswertung

CHBr₃

Folgende Wellenzahlen wurden für Tribrommethan (Bromophorm) bestimmt:

$\tilde{\nu}_{s,0}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_{as,0}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_{s,90}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_{as,90}$ (cm ⁻¹)	$\tilde{\nu}_l$ (cm ⁻¹)
(146, 2 ± 6, 4)	(163, 1 ± 6, 4)	(143, 6 ± 6, 4)	(165, 6 ± 6, 4)	153,8
(215, 6 ± 6, 4)	(231, 3 ± 6, 4)	(210, 3 ± 6, 4)	(228, 9 ± 6, 4)	222,3
		(368, 0 ± 6, 4)		
	(549, 6 ± 6, 4)	(526, 4 ± 6, 4)	(547, 3 ± 6, 4)	538,5
	(660, 4 ± 6, 4)	(644, 6 ± 6, 4)	(662, 7 ± 6, 4)	656,0
		(916, 8 ± 6, 4)		
		(1023, 7 ± 6, 4)		
(1148, 6 ± 6, 4)	(1129, 2 ± 6, 4)			1142,0
	(1209, 8 ± 6, 4)			
	(1279, 6 ± 6, 4)			
	(1373, 4 ± 6, 4)			
	(1417, 8 ± 6, 4)			
	(1537, 3 ± 6, 4)			
	(1588, 5 ± 6, 4)			
	(1673, 6 ± 6, 4)			
	(1768, 8 ± 6, 4)			
	(1868, 2 ± 6, 4)			
				3023,0

Tabelle 3.5: Vergleich der gemessenen Ramanlinien mit der Literatur für 0° und 90°-Polarisation im (Anti-)Stokes-Bereich für CHBr₃

Generell liegen die gemessenen Werte in der Größenordnung und überschneiden sich auch in den meisten Fällen mit den theoretisch zu erwartenden Werten. Die meisten Werte wurden in der 90°-Polarisation für die Stokes-Verschiebung gemessen. Die wenigsten für die Stokes-Verschiebung bei 0°-Polarisation. Wie auch in den angehängten Plots ersichtlich ist, ist bei 0°-Polarisation und im Stokes-Bereich das Hintergrundrauschen am stärksten. Dadurch ist es wahrscheinlich, dass das die Peaks, die in diesem Bereich eine geringe Intensität aufweisen, als Hintergrundrauschen angesehen und somit nicht gemessen wurden.

Die Werte, welche keinen Literaturwert zugeordnet werden können sind mit aller Wahrscheinlichkeit äußere Störeinflüsse, welche sich als Peak geäußert haben und somit mitaufgenommen worden sind. Einige Literaturwerte konnten gar nicht gemessen werden, da diese außerhalb des Messbereiches lagen.

3.3 Depolarisationsgrad

Im nächsten Schritt sollen die Depolarisationsgrade für die Proben CCl_4 , $CHCl_3$ bestimmt werden.

3.3.1 Off-Set des Monochromators

Bevor jedoch der Depolarisationsgrad bestimmt werden kann, müssen die Daten erneut bereinigt werden.

Die Messdaten sind nach oben verschoben und somit auch die Nulllinie des Spektrums. Die Daten werden falsch dargestellt. Damit man die benötigten Intensitäten bestimmen kann, muss dieser Offset berechnet und abgezogen werden.

Hierzu wird eine Gerade durch das Rauschen gefittet und von den Messdaten abgezogen.

Dies soll in der Nachfolgenden Grafik einmal dargestellt werden. Für die restlichen Daten wird es nicht mehr explizit gezeigt.

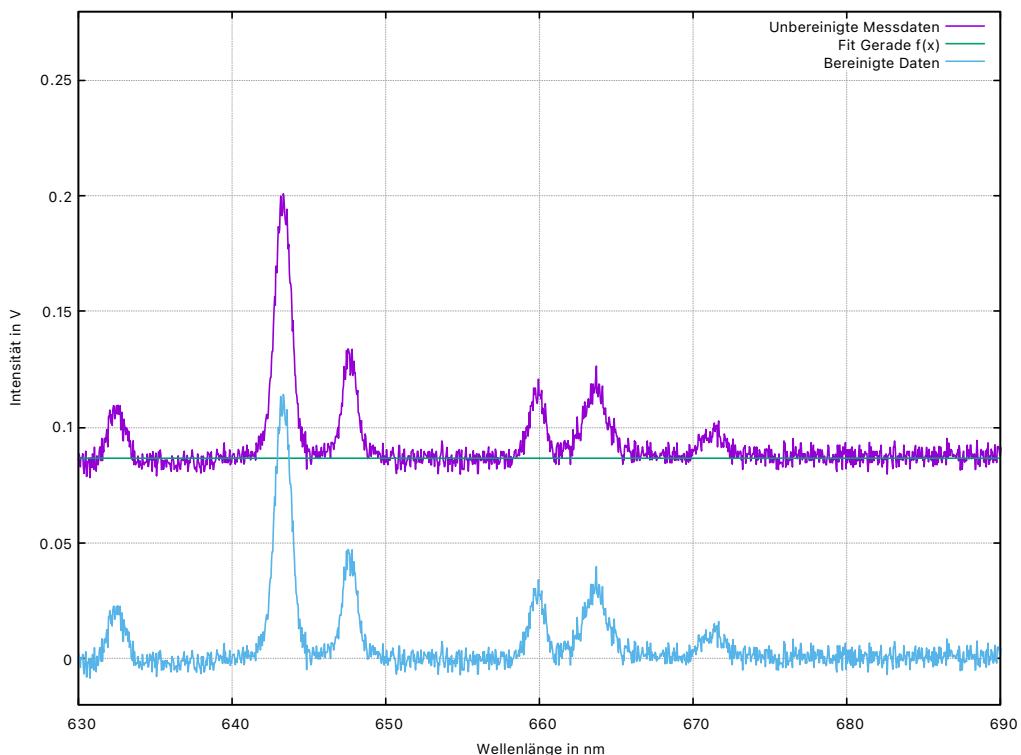


Abbildung 3.1: Spektrum von $CDCl_3$, im Anti-Stokes Bereich bei 0° Polarisation, zur Veranschaulichung der Bereinigung des Offsets der Messdaten mithilfe einer Fit-Geraden.

Im Folgenden wird nur noch mit den bereinigten Daten gerechnet.

Die veränderten Intensitäten, im Vergleich zu den im Versuch bestimmten, wurden mit der gleichen Methodik wie während dem Versuch bestimmt.

3 Auswertung

3.3.2 Berechnung des Depolarisationsgrad

Hierzu wird die im Skript angegebene Formel verwendet:

$$\rho = \frac{I_{\perp}}{I_{\parallel}} \quad (3.4)$$

ρ steht hier für den Depolarisationsgrad, dieser berechnet sich aus dem Verhältnis der senkrecht bzw. parallel zur einfallenden Strahlung polarisierten Anteile des Streulichts.

Die parallele Intensität ist die Intensität bei der der Polarisator und Analysator in die gleiche Richtung zeigen, in unserem Fall ist der Analysator vertikal ausgerichtet gewesen. Bei uns gilt also:

$$\rho = \frac{I_{\perp}}{I_{\parallel}} = \frac{I_{0^\circ}}{I_{90^\circ}} \quad (3.5)$$

Zur Berechnung des Depolarisationsgrade werden die Peak-Intensitäten bei 0° und 90° bestimmt. Jedoch ist es logisch, das nur die Peaks verwendet werden können, die sowohl bei dem Spektrum mit 0° bzw. 90° erkennbar sind.

Als Beispiel soll die folgende Grafik dies veranschaulichen:

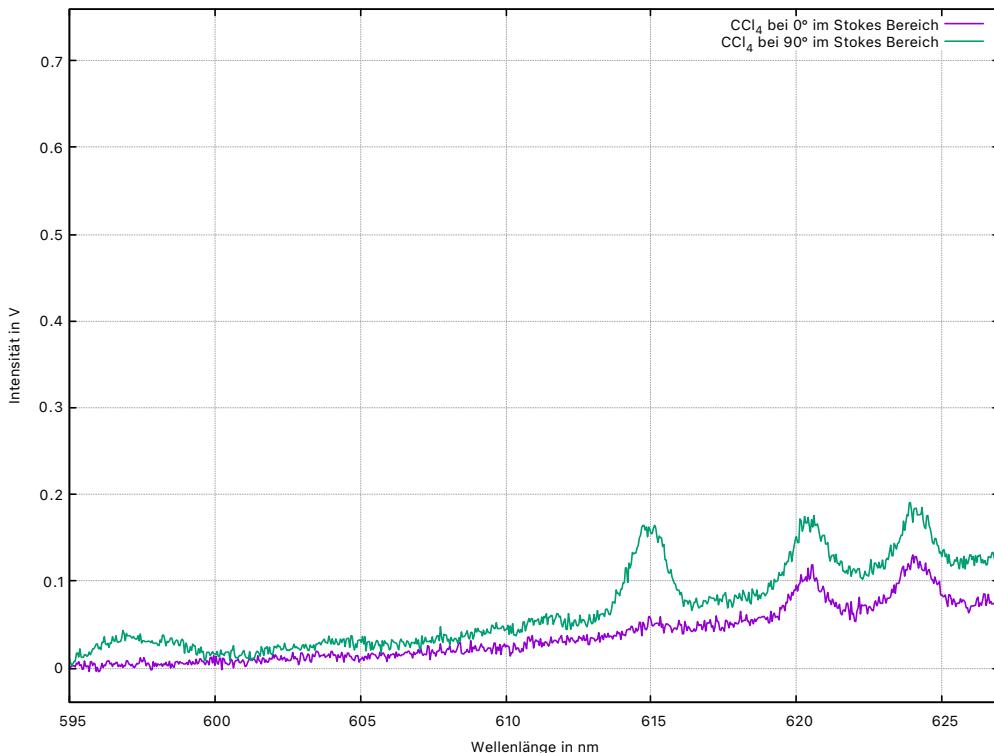


Abbildung 3.2: Spektrum von CCl_4 , im Stokes Bereich bei 0° und 90° . Zur Veranschaulichung der Peak-Intensitäten Bestimmung.

Wie man erkennen kann, liegt ein Peak bei 90° Polarisation bei ungefähr $\lambda = 595 nm$. Dieser Peak ist allerdings nicht bei einer Polarisation von 0° erkennbar. Somit kann dieser auch nicht bei der Depolarisationsgradbestimmung (vgl. Tabelle 3.8) berücksichtigt werden.

Die restlichen Spektren sind im Anhang zu finden.

3.3 Depolarisationsgrad

Der Fehler des Depolarisationsgrad wird mithilfe der Fehlerfortpflanzung berechnet:

$$s_\rho = \sqrt{\left(\frac{I_\perp}{I_\parallel^2} \cdot s_{I_\parallel}\right)^2 + \left(\frac{1}{I_\parallel} \cdot s_{I_\perp}\right)^2} \quad (3.6)$$

Die Ablesefehler der Intensitäten wurde abgeschätzt: $s_{I_\perp} = s_{I_\parallel} = 0,005 \text{ V}$. Somit erhält man die Folgende Werte:

Wellenlänge in nm	Intensität I_{0° in V	Intensität I_{90° in V	Depolarisation ρ	Fehler des Depolarisationsgrad s_ρ
618,4	0,01262	0,06726	0,1877	0,0756
622,4	0,04525	0,06828	0,6627	0,0878
628,4	0,01556	0,02638	0,5898	0,2201

Tabelle 3.6: Tabelle über die Wellenlänge der bestimmten Peaks von $CHCl_3$ im Stokesbereich, mit den entsprechenden Intensitäten für 0° und 90° Polarisation sowie dem Depolarisationsgrad und dessen Fehler.

Wellenlänge in nm	Intensität I_{0° in V	Intensität I_{90° in V	Depolarisation ρ	Fehler des Depolarisationsgrad s_ρ
643,3	0,12102	0,16876	0,7171	0,0365
647,7	0,04695	0,24990	0,1879	0,0204
660,7	0,02184	0,22790	0,0958	0,0220
664,9	0,02812	0,03461	0,8123	0,1861
685,3	0,00879	0,01382	0,6359	0,4287

Tabelle 3.7: Tabelle über die Wellenlänge der bestimmten Peaks von $CHCl_3$ im Anti-Stokesbereich, mit den entsprechenden Intensitäten für 0° und 90° Polarisation sowie dem Depolarisationsgrad und dessen Fehler.

Wellenlänge in nm	Intensität I_{0° in V	Intensität I_{90° in V	Depolarisation ρ	Fehler des Depolarisationsgrad s_ρ
620,5	0,11861	0,17082	0,6943	0,0356
624,1	0,12261	0,18396	0,6665	0,0327

Tabelle 3.8: Tabelle über die Wellenlänge der bestimmten Peaks von CCl_4 im Stokesbereich, mit den entsprechenden Intensitäten für 0° und 90° Polarisation sowie dem Depolarisationsgrad und dessen Fehler.

3 Auswertung

Wellenlänge in nm	Intensität I_{0° in V	Intensität I_{90° in V	Depolarisation ρ	Fehler des Depolarisationsgrad s_ρ
641,5	0,14366	0,20090	0,7151	0,0306
645,7	0,14717	0,22574	0,6520	0,0264
651,7	0,07072	0,51630	0,1370	0,0098
665,5	0,03812	0,06580	0,5793	0,0878

Tabelle 3.9: Tabelle über die Wellenlänge der bestimmten Peaks von CCl_4 im Anti-Stokesbereich, mit den entsprechenden Intensitäten für 0° und 90° Polarisation sowie dem Depolarisationsgrad und dessen Fehler.

Die zu erwartenden Depolarisationsgrad-Werte sollten im Bereich $0 < \rho < 0,75$ liegen.

Raman-Linien mit $\rho = 0$ sind vollständig polarisiert und Linien mit $\rho = \frac{3}{4}$ sind depolarisiert. Unsere Werte des Depolarisationsgrad für die beiden Moleküle CCl_4 und $CHCl_3$ stimmen somit mit den Erwartungen überein.

Ein kleiner Polarisationsgrad bedeutet, dass die Schwingung symmetrisch ist. Einige Beispiele hierfür sind beim Molekül $CHCl_3$ die Raman-Linien bei einer Wellenlänge von 647,7 nm und 660,7 nm und beim Molekül CCl_4 die Linie bei 651,7 nm.

Im umgekehrten Fall ist die Schwingung antisymmetrisch. Einige Beispiele sind beim Molekül $CHCl_3$ die Linien der Wellenlängen 622,4 nm sowie 643,3 nm und beim Molekül CCl_4 die Linie bei einer Wellenlänge von 624,1 nm. Diese Werte passen im groben mit den Literaturwerten überein (vgl. Herzberg, 1945).

Wie allerdings zu erkennen ist, sind einige der Fehler des Depolarisationsgrades ziemlich hoch, das hängt mit der ungenauen Bestimmung der Peak-Intensitäten zusammen.

3.4 Lage der Raman-Linien aller Moleküle

Im Folgenden soll die Lage der Raman-Linien aller gemessenen Moleküle zum besseren Vergleich in ein Diagramm 3.3 geplottet werden.

Zusätzlich wurde in das Diagramm die entsprechenden Literaturwerte geplottet (vgl. Herzberg, 1945). Bei den gemessenen Daten wurde zwischen Polarisation und Depolarisation unterschieden, diese wurde, wie im Vorangegangenen Abschnitt bereits erläutert, bestimmt. Die verwendeten Werte sind im Anhang zu finden. Es wurden allerdings nur die Anti-Stokes Werte verwendet, da diese deutlicher zu erkennen waren und die Zuordnung zu den Literaturwerten somit leichter fiel. Die Fehler wurden aufgrund der Übersichtlichkeit weggelassen.

Wie man an der Grafik 3.3 erkennen kann, liegen die gemessenen Linien in der Nähe der theoretischen. Jedoch gibt es mehr Linien bei den Literaturwerten, als wie wir gemessen haben. Eine mögliche Erklärung wäre, dass diese Peaks eine zu geringe Intensität hatten und sie somit nicht als Peak wahrgenommen wurden, sondern wahrscheinlich als Hintergrundrauschen interpretiert wurden. Des Weiteren liegen einige der Literaturwerte nahe zusammen, das heißt die Werte die eigentlich zwei (oder drei) verschiedene sind, wurden während dem Versuch als nur ein Wert interpretiert.

Zusätzlich ist erkennbar, dass eine Raman-Linie bei jedem Molekül in etwa bei der gleichen Wellenzahl $\nu \approx 280 \frac{1}{\text{cm}}$ liegt. Somit ist es wahrscheinlich, dass diese Raman-Linie mit dem C-Atom in Verbindung steht, da dieses ebenfalls in jedem Molekül vorhanden ist. Zudem fällt auf, dass eine weitere Wellenzahl $\nu \approx 650 \frac{1}{\text{cm}}$ öfters in Erscheinung tritt, diese ist bei Verbindungen mit einem H-Atom erkennbar.

Aber auch die Cl_3 Verbindung ist in der Raman-Linie $\nu \approx 780 \frac{1}{\text{cm}}$ zu erkennen.

Dies soll allerdings im Folgenden noch genauer erläutert werden.

3 Auswertung

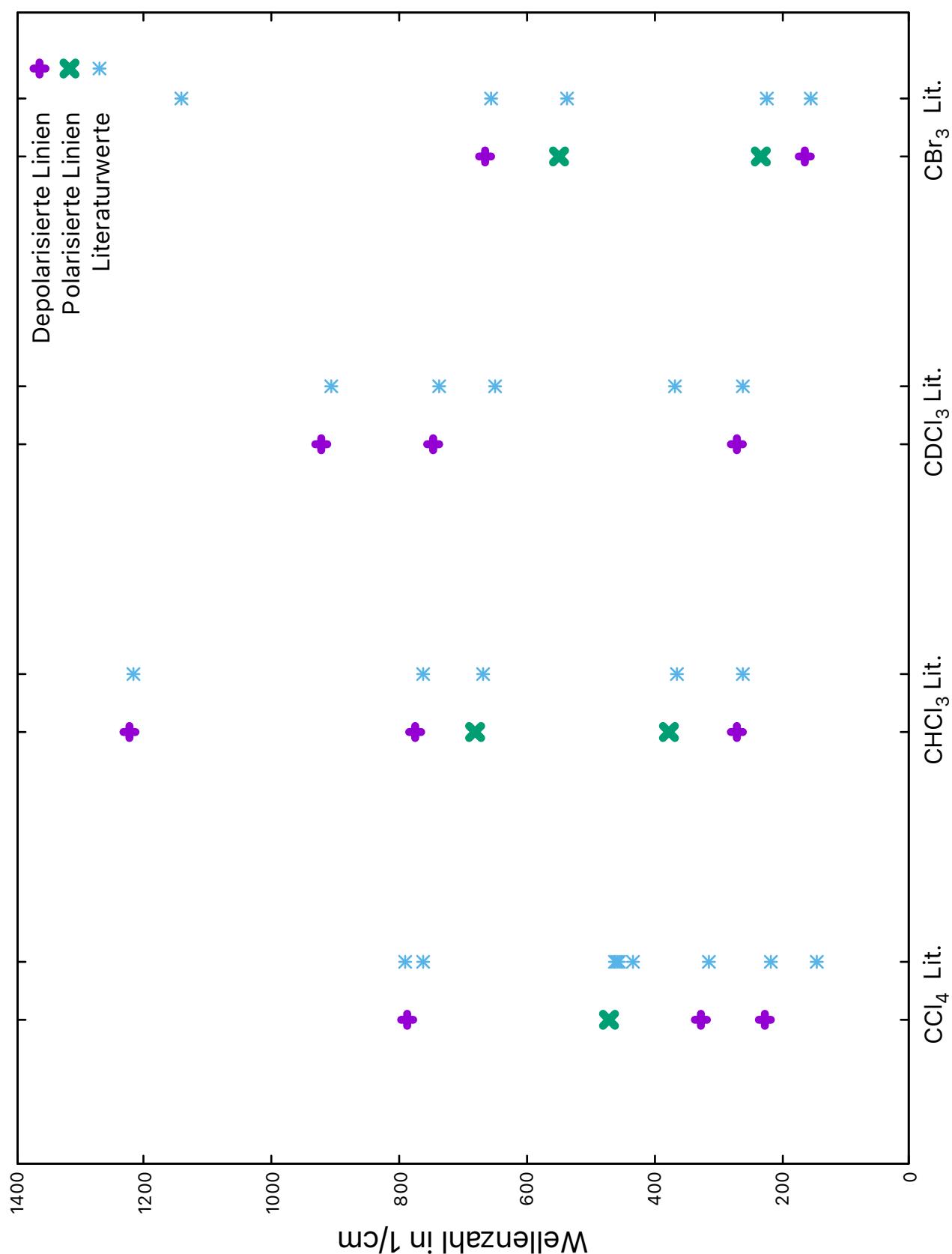


Abbildung 3.3: Lager der Raman Linien für die Moleküle CHl_3 , $CDCl_3$, CCl_4 und $CHBr_3$ mit den entsprechenden Literaturwerten.

3.5 Zuordnung der Molekülschwingungen zu den Ramanlinien & Diskussion

3.5.1 Vorwissen

Um den Ramanlinien nun eine Molekülschwingung zuzuordnen ist etwas Vorausberechnung nötig.

Je symmetrischer die Schwingung des Moleküls ist, desto kleiner ist ihr Depolarisationsgrad (Bei einer symmetrischen Schwingung ist der Polarisationsgrad gleich null) (vgl. Chemgapedia, 2021b). Je kleiner der Depolarisationsgrad der Linie ist, desto polarisierter ist diese im Spektrum.

Des Weiteren wird zwischen Valenz- und Deformationsschwingungen unterschieden. Bei Ersteren verändern sich die Bindungslängen, was mehr Energie braucht (vgl. Spektrum, 2021b). Bei Deformations schwingungen hingegen ändern sich nur die Bindungswinkel, was mit geringerem Energieaufwand stattfinden kann und sich mit einer kleineren Wellenzahl zeigt (vgl. Spektrum, 2021a).

Nun folgt noch aus der klassischen Mechanik, dass ein harmonischer Oszillator mit einer hohen Masse langsamer schwingt als einer mit einer kleinen. Deswegen hat man bei hohen Massen kleine Wellenzahlen.

Komplett symmetrische fünfatomige Moleküle der Form CY_4 , wie CCl_4 können folgende Normalschwingungen haben:

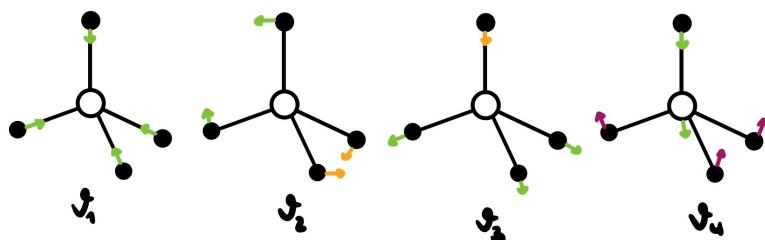


Abbildung 3.4: Normalschwingungen für symmetrische fünfatomige Moleküle

Fünfatomige Moleküle der Form CXY_3 , wie der Rest den von uns vermessenen Proben, können folgende Normalschwingungen haben:

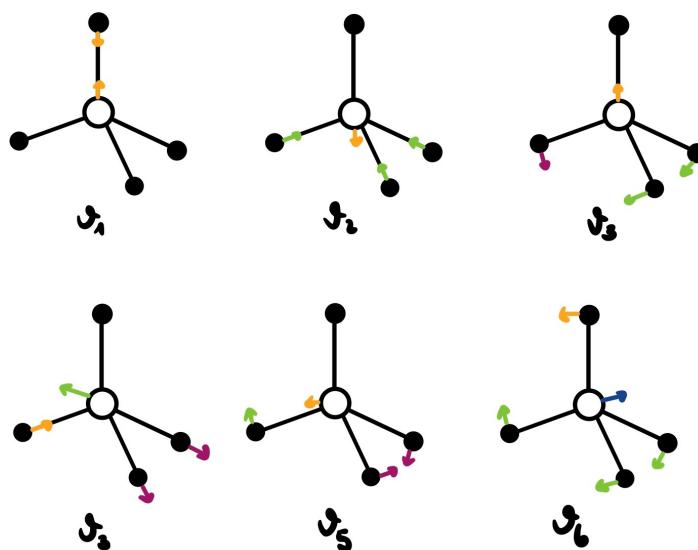


Abbildung 3.5: Normalschwingungen für nicht symmetrische fünfatomige Moleküle

3 Auswertung

3.5.2 Zuordnung von Molekülschwingungen zu den gemessenen Linien

CCl_4

Bei CCl_4 ist die am stärksten polarisierte Schwingung, jene mit dem Literaturwert $\tilde{\nu} = 458,4 \text{ cm}^{-1}$. Deswegen handelt es sich bei dieser Schwingung um die symmetrischste der Normalschwingungen, also die Valenzschwingung ν_1 .

Die Schwingung mit der größten Wellenzahlen, $\tilde{\nu} = 762,0 \text{ cm}^{-1}$, muss auch eine Valenzschwingung sein. Daher kommt hier nur die Normalschwingung ν_3 in Frage.

Die restlichen beiden Linien sind Deformationsschwingungen. Die Schwingung mit der höheren Energie, $\tilde{\nu} = 314,0 \text{ cm}^{-1}$ ist der Normalschwingung ν_4 zugeordnet, da diese an einer Bindung ein Teil einer Valenzschwingung ausführt.

Somit folgt nun, dass der Linie $\tilde{\nu} = 217,9 \text{ cm}^{-1}$ die Normalschwingung ν_2 zugeordnet werden kann. Zusammengefasst folgt:

Normalschwingung	$(\nu_{\text{CCl}_4})_l (\text{cm}^{-1})$
ν_1	458,4
ν_2	217,9
ν_3	762,0
ν_4	314,0

Tabelle 3.10: Zuordnung der Normalschwingungen zu den dazugehörigen Literaturwerten

$\text{CHCl}_3, \text{CDCl}_3, \text{CHBr}_3$

Durch die Symmetriebrechung entstehen zwei weitere Normalschwingung.

Es werden nun die Linien anhand von CHCl_3 den einzelnen Schwingungen zugeordnet und dann die Wellenzahlen von den anderen beiden Proben übernommen.

Bei CHCl_3 sind zwei polarisierte Linien erkennbar, nämlich $\tilde{\nu} = 365,9 \text{ cm}^{-1}$ und $\tilde{\nu} = 668,3 \text{ cm}^{-1}$. Dieser werden den zwei symmetrischsten Normalschwingungen ν_2 und ν_3 zugeordnet. Die höhere Wellenzahl wird der Normalschwingung ν_2 zugeordnet, da diese mehr Valenzschwingung besitzt als die Normalschwingung ν_3 . Die Normalschwingung ν_3 wird also der niedrigeren Wellenzahl zugeordnet, da es eine Deformationsschwingung ist.

Die Schwingung mit der höchsten Wellenzahl $\tilde{\nu}_l = 3018,9 \text{ cm}^{-1}$ wird der Normalschwingung ν_1 zugeordnet, da es sich hierbei um eine Valenzschwingung der C-H Achse handelt (kleine Masse \rightarrow hohe Wellenzahl).

Die Linie $\tilde{\nu}_l = 1215,6 \text{ cm}^{-1}$ kann man der Normalschwingung ν_6 zuzuordnen, da hier wieder das H-Atom mitbewegt wird, was eine hohe Wellenzahl zur Folge hat.

Der Normalschwingung ν_4 ordnet man die Linie $\tilde{\nu}_l = 761,2 \text{ cm}^{-1}$ zu, da hier das Molekül eine Valenzschwingung ohne das H-Atom ausführt.

Somit bleibt nur noch für die Linie $\tilde{\nu}_l = 260,0 \text{ cm}^{-1}$ die Normalschwingung ν_5 übrig, was auch sinnig ist, da hier eine Deformationsschwingung ohne das H-Atom ausgeführt wird.

3.5 Zuordnung der Molekülschwingungen zu den Ramanlinien & Diskussion

Zusammengefasst folgt:

Normalschwingung	$(\nu_{CHCl_3})_l \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$(\nu_{CDCl_3})_l \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$(\nu_{CHBr_3})_l \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
ν_1	3018,9	2250,0	3023,0
ν_2	668,3	650,8	538,5
ν_3	365,9	366,5	222,3
ν_4	761,2	737,6	656,0
ν_5	260,0	262,0	153,8
ν_6	1215,6	908,3	1142,0

Tabelle 3.11: Zuordnung der Normalschwingungen zu den unsymmetrischen Molekülen mit den entsprechenden Literaturwerten

Beim Austausch von Chlor zu Brom ($CHCl_3 \leftrightarrow CHBr_3$) oder Wasserstoff zu Deuterium ($CHCl_3 \leftrightarrow CDCl_3$) ändert sich die Zuordnung der Normalschwingungen nicht. Er werden zwar die einzelnen Linien 'herumgeschoben' aufgrund des Massenunterschieds.

Zum Beispiel sind die Wellenzahlen für die Linien mit Brom geringer, als die mit Chlor, da Brom um einiges schwerer ist als Chlor. Besonders deutlich wird es wenn man sich die Normalschwingung ν_1 für Wasserstoff und Deuterium anschaut. Da Deuterium doppelt so schwer wie Wasserstoff ist, ist die Schwingungslinien von Deuterium viel kleiner als die von Wasserstoff (ca. nur ein Viertel davon).

3 Auswertung

3.6 Vergleich der Verhältnisse der gemessenen Schwingungsfrequenzen mit theoretisch zu erwartenden Werten

Für die theoretische Schwingungsfrequenz gilt folgende Formel (vgl. Chemgapedia, 2021a):

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (3.7)$$

Hierbei steht k die Federkonstante zwischen den Kohlenstoffatom und dem Schwingungspartner. μ steht für die reduzierte Masse, welche wie folgt definiert ist:

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \quad (3.8)$$

Für das Verhältnis von zwei Schwingungen (mit gleicher Federkonstante) gilt:

$$\frac{\nu_1}{\nu_2} = \sqrt{\frac{\mu_2}{\mu_1}} = \frac{\tilde{\nu}_1}{\tilde{\nu}_2} \quad (3.9)$$

Wir wollen nun die Schwingungsfrequenzen (bzw. Wellenzahlen) von Molekülen vergleichen, bei denen je eine Atomart ausgetauscht wurde. Es werden hier der Unterschied zwischen den Schwingungen $CHCl_3$ und $CDCl_3$ & $CHCl_3$ und $CHBr_3$ angeschaut. Mit den Massen der einzelnen Atome (Chlor, Wasserstoff, Deuterium, Kohlenstoff) wurden folgende reduzierte Massen berechnet (vgl. Almer, 2015):

$$\mu_{C-H} = 0,92974 \text{ u} \quad (3.10)$$

$$\mu_{C-D} = 1,72464 \text{ u} \quad (3.11)$$

$$\mu_{C-Br} = 10,4162 \text{ u} \quad (3.12)$$

$$\mu_{C-Cl} = 8,93414 \text{ u} \quad (3.13)$$

Für die theoretischen Schwingungsfrequenzen folgt nun:

$$\frac{\tilde{\nu}_{C-H}}{\tilde{\nu}_{C-D}} = 1,362 \quad (3.14)$$

$$\frac{\tilde{\nu}_{C-Cl}}{\tilde{\nu}_{C-Br}} = 1,079762594 \quad (3.15)$$

Um nun das Verhältnis unserer gemessenen Werte zu berechnen, werden die jeweils gemessenen Wellenzahlen für 0° -Polarisation, 90° -Polarisation, Stokes- und Anti-Stokes-Linie gemittelt und anschließend dann das Verhältnis bestimmt.

Somit erhält man beim Vergleich von $CHCl_3$ zu $CDCl_3$:

$\tilde{\nu}_{CHCl_3}$ (cm $^{-1}$)	$\tilde{\nu}_{CDCl_3}$ (cm $^{-1}$)	$\tilde{\nu}_{CHCl_3}/\tilde{\nu}_{CDCl_3}$
$262,43 \pm 3,2$	$258,73 \pm 3,2$	$1,014 \pm 0,018$
$363,45 \pm 3,2$	$362,80 \pm 3,2$	$1,002 \pm 0,012$
$668,70 \pm 2,8$	$651,87 \pm 2,8$	$1,026 \pm 0,006$
$763,20 \pm 2,8$	$745,95 \pm 2,3$	$1,023 \pm 0,005$
$1219,57 \pm 2,8$	$922,60 \pm 2,8$	$1,322 \pm 0,005$

Tabelle 3.12: Verhältnis der gemessenen Werte von $CHCl_3$ zu $CDCl_3$

3.6 Vergleich der Verhältnisse der gemessenen Schwingungsfrequenzen mit theoretisch zu erwartenden Werten

Und beim Vergleich von $CHCl_3$ zu $CHBr_3$:

$\tilde{\nu}_{CHCl_3}$ (cm $^{-1}$)	$\tilde{\nu}_{CHBr_3}$ (cm $^{-1}$)	$\tilde{\nu}_{CHCl_3}/\tilde{\nu}_{CHBr_3}$
262,43 ± 3,2	154,63 ± 3,2	1,697 ± 0,041
363,45 ± 3,2	221,53 ± 3,2	1,641 ± 0,028
668,70 ± 2,8	541,10 ± 2,8	1,236 ± 0,008
763,20 ± 2,8	655,90 ± 2,8	1,164 ± 0,007
1219,57 ± 2,8	1138,90 ± 2,3	1,071 ± 0,003

Tabelle 3.13: Verhältnis der gemessenen Werte von $CHCl_3$ zu $CHBr_3$

Für die Literaturwerte folgt:

$\tilde{\nu}_{CHCl_{3l}}$ (cm $^{-1}$)	$\tilde{\nu}_{CDCl_{3l}}$ (cm $^{-1}$)	$\tilde{\nu}_{CHCl_{3l}}/\tilde{\nu}_{CDCl_{3l}}$
260,0	262,0	0,992
365,9	366,5	0,998
668,3	650,8	1,027
761,2	737,6	1,032
1215,6	908,3	1,338
3018,9	2250,0	1,342

Tabelle 3.14: Verhältnis der aus der Literatur entnommenen Werte

$\tilde{\nu}_{CHCl_{3l}}$ (cm $^{-1}$)	$\tilde{\nu}_{CHBr_{3l}}$ (cm $^{-1}$)	$\tilde{\nu}_{CHCl_{3l}}/\tilde{\nu}_{CHBr_{3l}}$
260,0	153,8	1,691
365,9	222,3	1,646
668,3	538,5	1,241
761,2	656,0	1,160
1215,6	1142,0	1,064
3018,9	3023,0	0,999

Tabelle 3.15: Verhältnis der aus der Literatur entnommenen Werte

Die gemessenen Werte für das Verhältnis passen mit den Literaturwerten überein. Für beide Messreihen gilt, je größer die Wellenzahl ist, desto genauer ist man an dem theoretischen Verhältnis der Frequenz dran. Beim Vergleich zwischen $CHCl_3$ und $CDCl_3$ steigt das Verhältnis der Wellenzahlen an und beim Vergleich zwischen $CHCl_3$ und $CHBr_3$ fällt dieses ab.

4 Fazit

Der Versuch Raman-Spektroskopie vermittelte einen tieferen Einblick in die Strukturen und Schwingungen von Molekülen. Während dem Versuch wurden Spektren der Moleküle Tetrachlorkohlenstoff (CCl_4), Chloroform ($CHCl_3$), deuteriertem Chloroform ($CDCl_3$) und Bromoform ($CHBr_3$) aufgenommen. Anschließend wurden die aufgenommenen Raman-Spektren mit Literaturwerten verglichen. Unsere gemessenen Werte stimmen gut mit den theoretischen überein. Die Lage der Raman-Linien war, unter Berücksichtigung der Fehler, gut den Literaturwerten zu ordnen. Natürlich fehlten uns einige Raman-Linien, dies ist jedoch nicht weiter verwunderlich, da unsere Möglichkeit die Raman-Linien zu identifizieren beschränkt waren. Auch die bestimmten Depolarisationsgrade weichen nicht stark von den theoretisch erwarteten ab. Ähnlich war dies auch bei der Zuordnung der Molekülschwingungen, auch diese konnten zugeordnet werden.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der Versuch unser Verständnis über Molekülschwingungen sowie Molekülstrukturen erheblich verbessert hat.

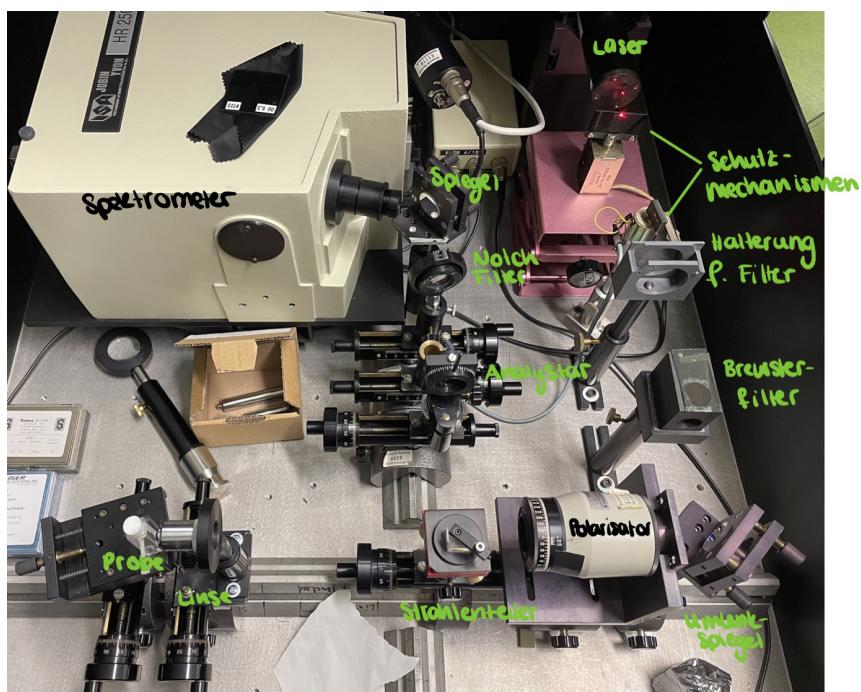
A Messprotokoll

Versuch: Raman-Spektroskopie

Datum: 27.September2021
Ort: NW2, Uni Bayreuth
Raum: 2.1.01.469

I. Versuchsaufbau:

Der Versuch wurde vom Betreuer bereits aufgebaut und sieht wie folgt aus:



Zuerst wurde die Probe CDCl_3 verwendet.

Hierzu wurde die Probe in den Probenbehälter gesetzt und mit einer Plastik-Schraube leicht befestigt. Anschließend wurde sie mithilfe eines Rädchen näher an die Linse gebracht. Hierfür wurde ein Blättchen Papier zwischen die Proben-Küvette und die Linse gehalten, damit das Glas des Probenbehälter nicht zerkratzt und nun die beiden Objekte so nahe wie möglich aneinander gefahren. Dieses Verfahren wird bei jedem Probenwechsel wiederholt.

Alle Proben werden jeweils für 0° und 90° Polarisation gemessen.

II. Die Messbereiche und die Reihenfolge der Proben sind wie folgt festgelegt:

1. **CDCl₃: ± 1400 1/cm**
→ Stokes: 570nm – 640nm
→ Rayleigh: ca. 632nm
→ Antistokes: 625nm-700nm
2. **CCl₄: ± 900 1/cm**
→ Stokes: 560nm – 640nm
→ Rayleigh: ca. 632nm
→ Antistokes: 625nm-675nm
3. **CHCl₃: ± 1200 1/cm**
→ Stokes: 560nm – 640nm
→ Rayleigh: ca. 632nm
→ Antistokes: 625nm-690nm
4. **CHBr₃: ± 1400 1/cm**
→ Stokes: 560nm – 635nm
→ Rayleigh: ca. 632nm
→ Antistokes: 625nm-680nm

III. Einstellungen des Messprogramm:

Monochromator speed at 0,01 nm/step
15,5 s/nm = 0,155 s/step
Pixel/range: 1250
Ablesefehler (beim Bestimmen der Peaks)
 $s_\lambda = 0,2 \text{ nm}$
 $s_I = 0,005 \text{ V}$

IV. Messdaten

1. CDCl_3

Name	$\text{CDCl}_3\text{-spol0}$	Stokes	
Pol	0		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	581,6	0,0877	klein
2	587,1	0,09	klein
3	618,4	0,0956	klein
4	622,4	0,1218	
5	628,4	0,0953	
6	632,4	0,1064	Rayleigh

Name	$\text{CDCl}_3\text{-aspol0}$	Anti-Stokes	
Pol	0		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	628,4	0,0953	s. Stokes
2	632,4	0,1064	Rayleigh
3	643,2	0,1926	
4	647,5	0,1339	
5	659,9	0,117	
6	663,7	0,1147	
7	671,3	0,0989	klein

Name	$\text{CDCl}_3\text{-aspol90}$	Anti-Stokes	
Pol	90		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	628,5	0,1109	s. Stokes
2	632,2	0,1734	Rayleigh
3	643,2	0,2593	
4	647,5	0,3487	
5	659,7	0,3535	
6	663,6	0,1355	
7	671,4	0,1036	klein

Name	_CDCL3_spol90	Stokes	
Pol	90		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	576,1	0,1733	
2	581,7	0,1723	
3	584,8	0,1198	
4	587,1	0,1565	
5	590,2	0,1435	
6	597	0,1205	Überlappung
7	598,4	0,1167	Überlappung
8	607,6	0,1199	
9	611,5	0,1037	
10	618,4	0,162	
11	622,5	0,1594	
12	628,5	0,1198	
13	632,2	0,1743	Rayleigh

2. CCl₄

Name	_CCL4_spol0	Stokes	
Pol	0		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	620,4	0,1993	
2	624,1	0,2186	
3	632,4	0,1187	Rayleigh

Name	_CCL4_aspol0	Anti-Stokes	
Pol	0		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	632,5	0,1217	Rayleigh
2	641,5	0,3052	Überlappung
3	645,5	0,3065	Überlappung
4	651,6	0,2253	
5	665,2	0,2056	sehr breit

Name	_CCL4_aspol90	Anti-Stokes	
Pol	90		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	632,2	0,1772	Rayleigh
2	641,5	0,4080	Überlappung
3	645,6	0,4297	Überlappung
4	651,6	0,7331	
5	665,5	0,2778	breit

Name	_CCL4_spol90	Stokes	
Pol	90		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	565,4	0,1395	
2	568,8	0,1395	
3	571,5	0,1132	
4	574,4	0,1263	Doppelpeak
5	576,1	0,1793	Doppelpeak
6	581,6	0,1686	
7	584,9	0,1224	
8	587,2	0,1639	
9	590,2	0,1490	
10	593,4	0,1148	klein, verwaschen
11	597,0	0,1348	Doppelpeak, eng
12	598,6	0,1282	Doppelpeak, eng
13	604,1	0,1313	verwaschen
14	614,9	0,2601	
15	620,3	0,2649	
16	624,0	0,2817	
17	632,3	0,1850	Rayleigh

3. CHCl₃

Name	_CHCl3_spol0	Stokes	
Pol	0		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	618,3	0,1128	
2	622,3	0,1405	
3	628,4	0,1113	
4	632,4	0,1140	Rayleigh

Name	_CHCL3_aspol0	Anti-Stokes	
Pol	0		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	628,4	0,1214	s. Stokes
2	632,4	0,1229	Rayleigh
3	643,4	0,2243	
4	647,6	0,1491	
5	660,6	0,1283	
6	664,7	0,1320	
7	685,4	0,1147	sehr breit

Name	_CHCL3_aspol90	Anti-Stokes	
Pol	90		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	628,6	0,1303	s. Stokes
2	632,2	0,1812	Rayleigh
3	640,1	0,1160	
4	643,4	0,2609	
5	647,6	0,3480	
6	660,5	0,3354	
7	664,8	0,1469	etwas breiter
8	685,5	0,1188	

Name	_CHCL3_spol90	Stokes	
Pol	90		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	565,5	0,1460	
2	568,6	0,1405	
3	571,6	0,1162	Überlappung
4	574,5	0,1330	Überlappung
5	581,5	0,1772	
6	584,9	0,1331	
7	587,2	0,1688	
8	590,1	0,1585	
9	593,6	0,1140	verwaschen, breit
10	597,7	0,1320	breit, verwaschen
11	603,6	0,1103	Hintergrund?
12	607,0	0,1272	
13	611,4	0,1169	
14	618,4	0,1802	
15	622,4	0,1724	
16	628,6	0,1330	
17	632,2	0,1941	Rayleigh

4. CHBr₃

Name	_CHBr3_spol0	Stokes	
Pol	0		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	623,9	0,1782	
2	626,6	0,2828	
3	632,4	0,1311	Rayleigh

Name	_CHBr3_aspol0	Anti-Stokes	
Pol	0		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	626,6	0,2904	s. Stokes
2	632,4	0,1258	Rayleigh
3	639,0	0,1828	
4	641,8	0,2659	
5	655,2	0,1820	

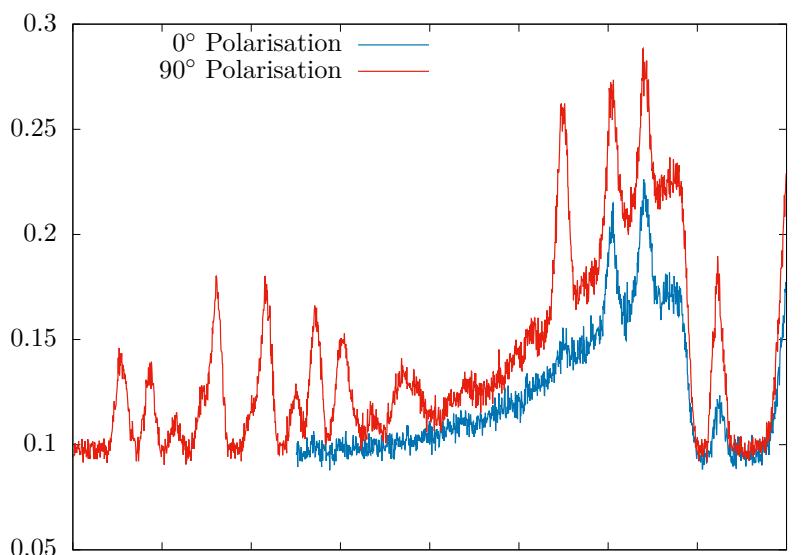
6	660,0	0,2272	
7	682,0	0,1404	klein, breit

Name	_CHBr3_aspol90	Anti-Stokes	
Pol	90		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	626,6	0,3571	s. Stokes
2	632,3	0,1801	Rayleigh
3	639,0	0,2112	
4	641,6	0,8724	
5	655,0	0,5136	
6	660,0	0,2670	

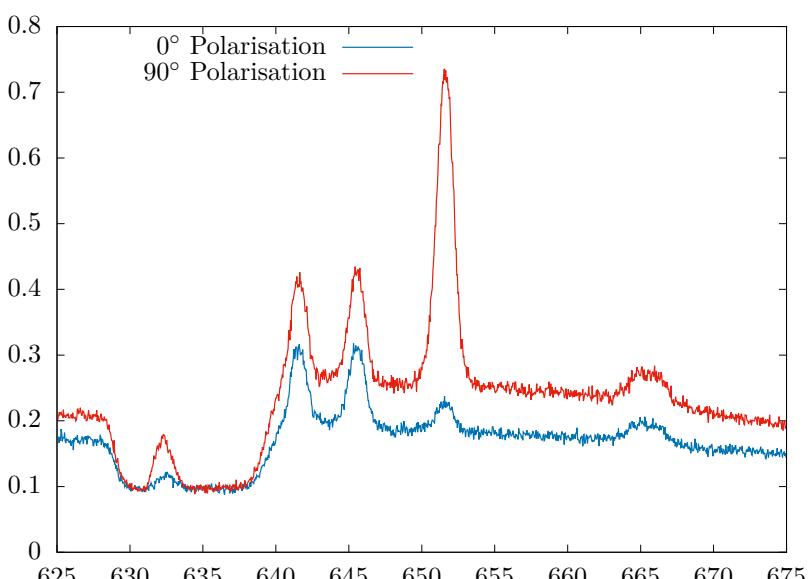
Name	_CHBr3_spol90	Stokes	
Pol	90		
Peak	Wellenlänge in nm	Intensität in V	Anmerkung
1	565,3	0,1453	
2	568,5	0,1398	
3	571,6	0,1214	Hintergrund?
4	574,4	0,1333	Überlappung1
5	576,1	0,1850	Überlappung1
6	580,1	0,1300	Überlappung2
7	581,6	0,1818	Überlappung2
8	584,8	0,1349	
9	587,2	0,1679	
10	590,0	0,1571	
11	593,7	0,1186	Hintergrund?
12	597,5	0,1028	Breit, verwaschen
13	607,4	0,1225	verwaschen
14	611,8	0,1754	
15	617,8	0,1253	Breit, verwaschen
16	623,9	0,4534	
17	626,5	0,3494	
18	632,2	0,1792	Rayleigh

B Gemessene Plots

B.1 Tetrachlormethan



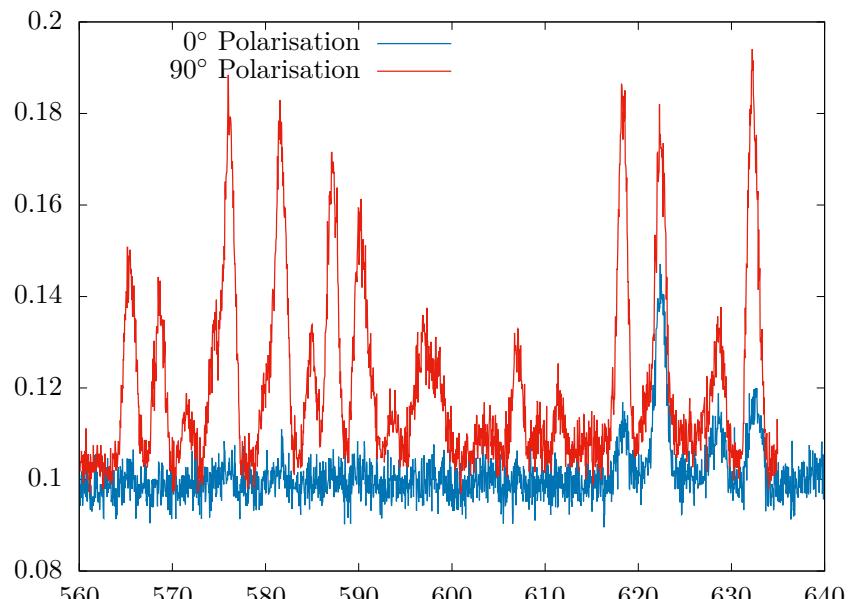
(a) Stokes Linien



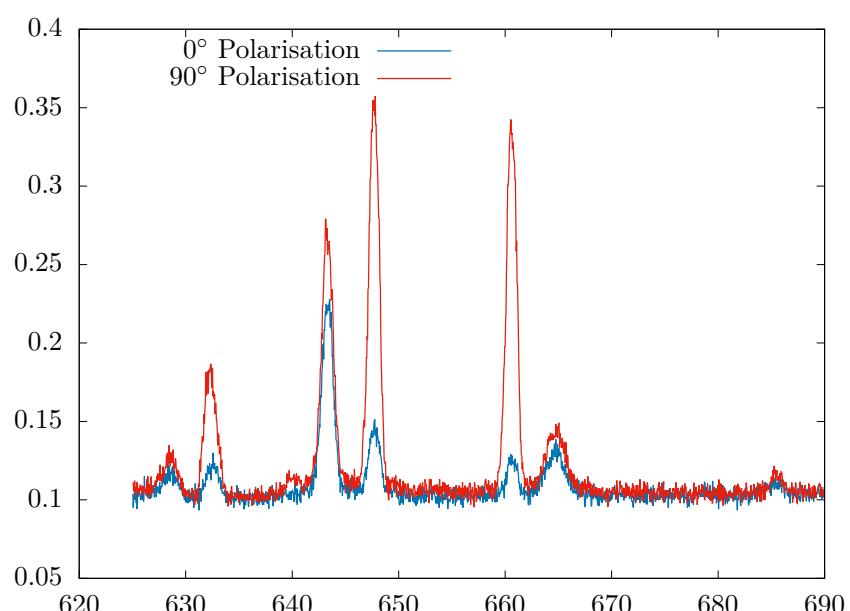
(b) Anti-Stokes Linien

Abbildung B.1: Gemessene Plots für Tetrachlormethan für 0° und 90° -Polarisation im (Anti-)Stokes-Bereich

B.2 Chlorophorm



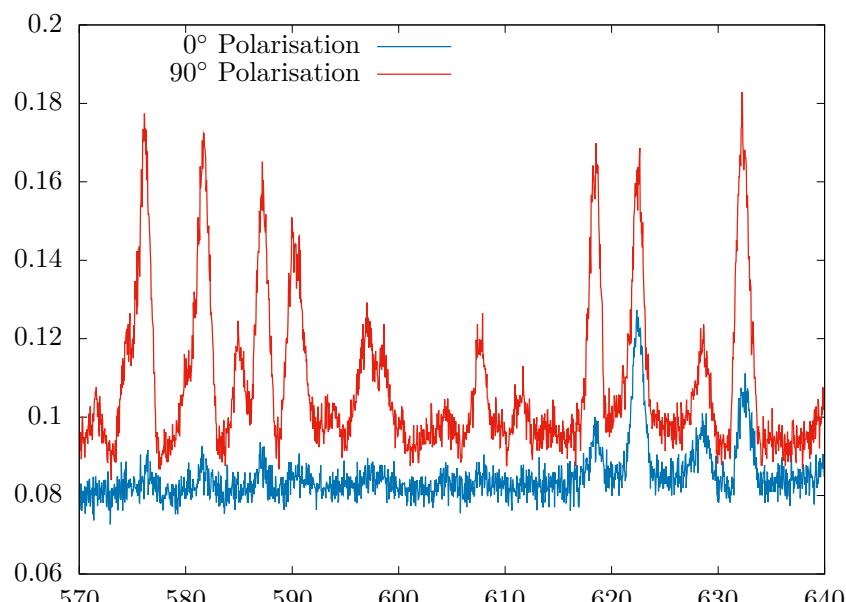
(a) Stokes Linien



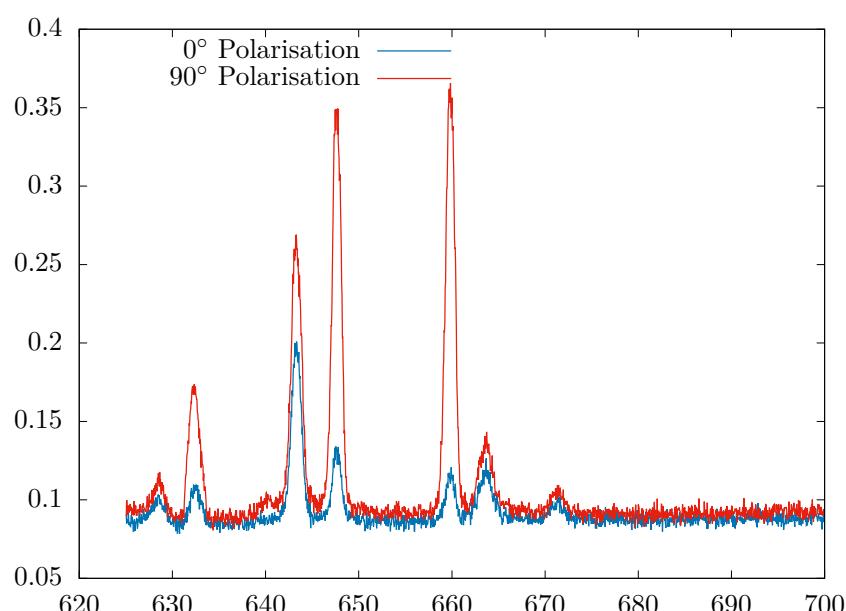
(b) Anti-Stokes Linien

Abbildung B.2: Gemessene Plots für Chlorophorm für 0° und 90° -Polarisation im (Anti-)Stokes-Bereich

B.3 Deuterium Chlorophorm



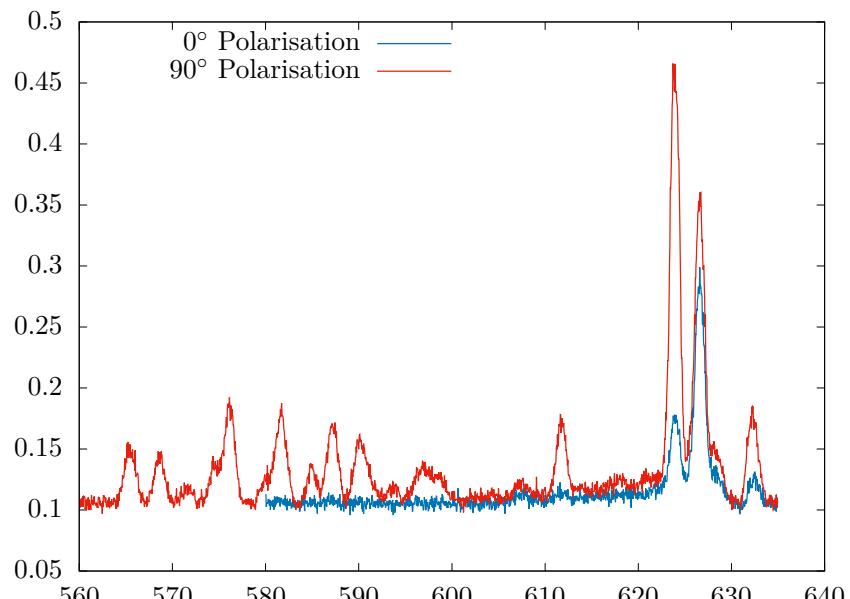
(a) Stokes Linien



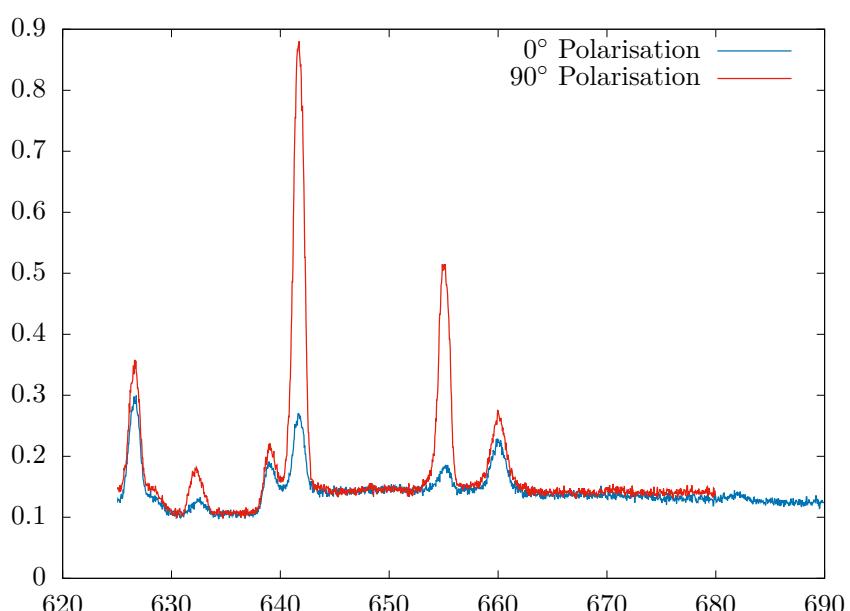
(b) Anti-Stokes Linien

Abbildung B.3: Gemessene Plots für Deuterium Chlorophorm für 0° und 90° -Polarisation im (Anti-)Stokes-Bereich

B.4 Bromophorm



(a) Stokes Linien



(b) Anti-Stokes Linien

Abbildung B.4: Gemessene Plots für Bromophorm für 0° und 90° -Polarisation im (Anti-)Stokes-Bereich

C Peaks für den Depolarisationsgrad

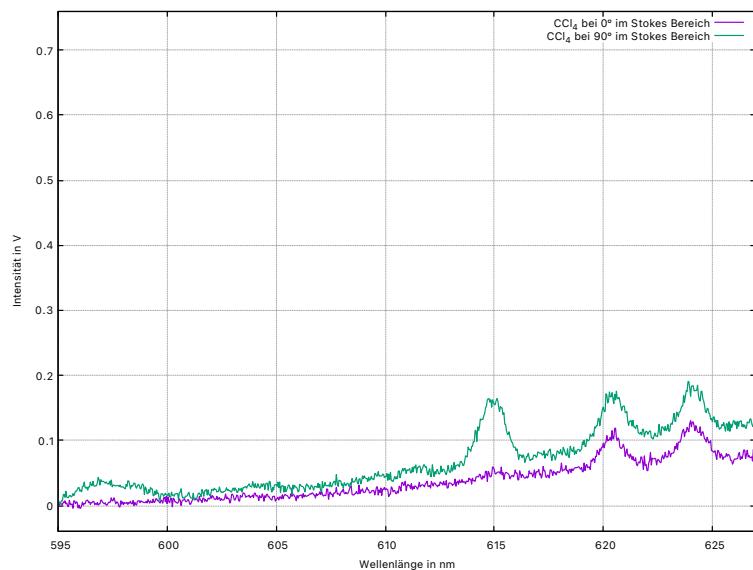


Abbildung C.1: Spektrum von CCl_4 , im Stokes Bereich bei 0° und 90° Polarisation.

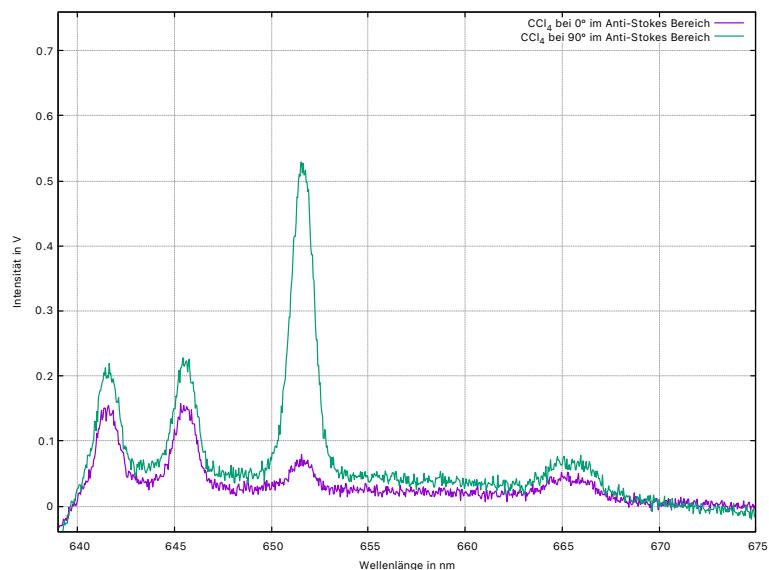


Abbildung C.2: Spektrum von CCl_4 , im Anti-Stokes Bereich bei 0° und 90° Polarisation.

C Peaks für den Depolarisationsgrad

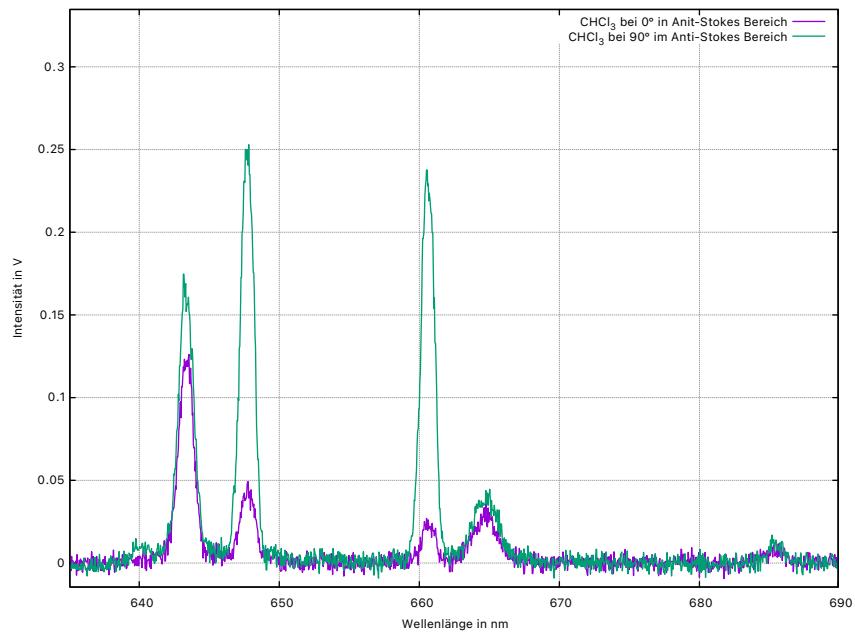


Abbildung C.3: Spektrum von $CHCl_3$, im Anti-Stokes Bereich bei 0° und 90° Polarisation.

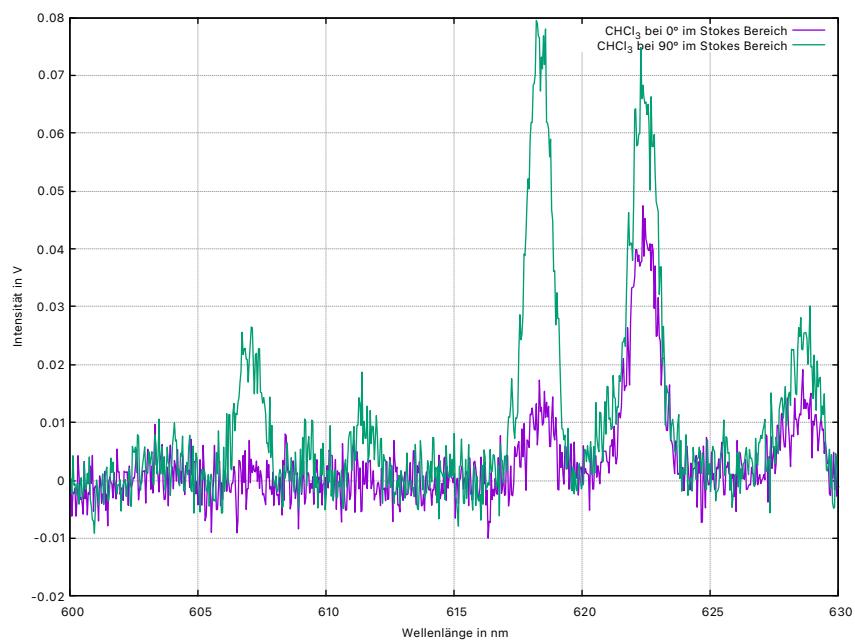


Abbildung C.4: Spektrum von $CHCl_3$, im Stokes Bereich bei 0° und 90° Polarisation. In dem Bereich, indem es zur Überschneidung in der Wellenlänge bei den Peaks sowohl bei 0° als auch bei 90° kommt.

D Werte für Lage der Raman-Linien

λ in nm	ν in $\frac{1}{\text{cm}}$	Fehler s_ν in $\frac{1}{\text{cm}}$	Intensität 0° in V	Intensität 90° in V	Depolarisations- grad ρ	Fehler Depol. s_ρ	Polarisation
643,3	270,4	12,1	0,1210	0,1688	0,7171	0,0365	Depol.
647,7	376,0	11,9	0,0470	0,2499	0,1879	0,0204	Pol.
660,7	679,8	11,5	0,0218	0,2279	0,0958	0,0220	Pol.
664,9	775,4	11,3	0,0281	0,0346	0,8123	0,1861	Depol.
685,3	1223,1	10,7	0,0088	0,0138	0,6359	0,4287	Depol.

Tabelle D.1: Wellenlänge, Wellenzahl, Fehler der Wellenzahl, Intensität für 90° und 0° , Depolarisationsgrad und Fehler des Depolarisationsgrad für $CHCl_3$ im Anti-Stokes-Bereich.

λ in nm	ν in $\frac{1}{\text{cm}}$	Fehler s_ν in $\frac{1}{\text{cm}}$	Intensität 0° in V	Intensität 90° in V	Depolarisations- grad ρ	Fehler Depol. s_ρ	Polarisation
643,3	270,4	12,1	0,1059	0,1747	0,6063	0,0335	Depol.
647,7	376,0	11,9	0,0434	0,2581	0,1681	0,0196	Pol.
659,9	661,5	11,5	0,0274	0,2651	0,1033	0,0190	Pol.
663,7	748,2	11,4	0,0320	0,0474	0,6754	0,1272	Depol.
671,4	921,0	11,1	0,0092	0,0181	0,5082	0,3092	Depol.

Tabelle D.2: Wellenlänge, Wellenzahl, Fehler der Wellenzahl, Intensität für 90° und 0° , Depolarisationsgrad und Fehler des Depolarisationsgrad für $CDCl_3$ im Anti-Stokes-Bereich.

D Werte für Lage der Raman-Linien

λ in nm	ν in $\frac{1}{\text{cm}}$	Fehler s_ν in $\frac{1}{\text{cm}}$	Intensität 0° in V	Intensität 90° in V	Depolarisations- grad ρ	Fehler Depol. s_ρ	Polarisation
639,0	165,8	12,3	0,0345	0,0655	0,5274	0,0863	Depol.
641,7	231,7	12,2	0,1201	0,7271	0,1652	0,0070	Pol.
655,1	550,4	11,7	0,0409	0,3626	0,1127	0,0139	Pol.
660,1	666,1	11,5	0,0841	0,1200	0,7007	0,0509	Depol.

Tabelle D.3: Wellenlänge, Wellenzahl, Fehler der Wellenzahl, Intensität für 90° und 0° , Depolarisationsgrad und Fehler des Depolarisationsgrad für $CHBr_3$ im Anti-Stokes-Bereich.

λ in nm	ν in $\frac{1}{\text{cm}}$	Fehler s_ν in $\frac{1}{\text{cm}}$	Intensität 0° in V	Intensität 90° in V	Depolarisations- grad ρ	Fehler Depol. s_ρ	Polarisation
641,5	226,8	12,2	0,1437	0,2009	0,7151	0,0306	Depol.
645,7	328,2	12,0	0,1472	0,2257	0,6520	0,0264	Depol.
651,7	470,8	11,8	0,0707	0,5163	0,1370	0,0098	Pol.
665,5	789,0	11,3	0,0381	0,0658	0,5793	0,0878	Depol.

Tabelle D.4: Wellenlänge, Wellenzahl, Fehler der Wellenzahl, Intensität für 90° und 0° , Depolarisationsgrad und Fehler des Depolarisationsgrad für CCl_4 im Anti-Stokes-Bereich.

Literaturverzeichnis

ALMER, J. 2015 *Formelsammlung Naturwissenschaften*, 2. Fassung. UHL Media.

CHEMAGAPEDIA 2021a Anzahl und arten von molekülschwingungen. URL http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/3/anc/ir_spek/molekuelschwingungen.vlu.html – Zugriffsdatum: 01.10.2021.

CHEMAGAPEDIA 2021b Messung des depolarisationsgrades. URL http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/3/anc/ir_spek/methoden.vlu/Page/vsc/de/ch/3/anc/ir_spek/schwspek/methoden/raman_spek/ir4_2_5/depol_m29ht0101.vscml/Supplement/1.html#:~:text=Der%20Depolarisationsgrad%20der%20Raman-Bande%20der%20symmetrischen%20Valenzschwingung,ist%20null.%20Alle%20anderen%20Raman-Banden%20sind%20depolarisiert. – Zugriffsdatum: 01.10.2021.

HERZBERG, GERHARD 1945 *Molekular Spectra and Molekular strucuture*, vol. 2, pp. 310–321. National Research Council of Canada.

SPEKTRUM 2021a Deformationsschwingungen. URL <https://www.spektrum.de/lexikon/chemie/deformationsschwingungen/2253> – Zugriffsdatum: 01.10.2021.

SPEKTRUM 2021b Valenzschwingungen. URL <https://www.spektrum.de/lexikon/chemie/valenzschwingungen/9673> – Zugriffsdatum: 01.10.2021.