

UV/VIS-Spektroskopie:

Optische Bestimmung der Dissoziationsenergie von I₂

Es soll ein UV/VIS-Spektrum von Ioddampf aufgenommen werden. Daraus sollen die Bandensysteme der v'' -Progressionen ($v'' = 0, 1, 2$) bestimmt werden. Aus der $v'' = 0$ Progression soll mittels linearer Regression die Wellenzahl des Grenzüberganges bestimmt werden und daraus die Dissoziationsenergie von I₂ im Grund- und angeregten Zustand berechnet werden. Über die Boltzmannverteilung sollen die relativen Besetzungen der Schwingungsniveaus $v'' = 0, 1$ und 2 berechnet werden.

Die Energie eines Moleküls (ohne Translationsenergie) läßt sich als Summe von Elektronen-, Schwingungs- und Rotationsenergie darstellen:

$$E = E_{el} + E_{vib} + E_{rot}$$

Die Schwingungs- und Rotationsenergie sind für den elektronischen Grundzustand und angeregte Zustände quantisiert.

Das bei diesem Versuch aufgenommene Elektronenspektrum entsteht durch Übergänge zwischen den Schwingungsniveaus des elektronischen Grundzustandes und des angeregten Zustandes. Bandenlinien, die zu Übergängen zwischen Rotationsniveaus gehören, sind wegen der geringen Auflösung des Gerätes nicht zu erkennen.

Für die Übergangsfrequenz ν läßt sich schreiben:

$$\bar{\nu}hc = E'_{el} - E''_{el} + E'_{vib}(v') - E''_{vib}(v'') + E'_{rot}(J') - E''_{rot}(J'')$$

Der höhere Energiezustand ist hierbei mit einem Strich, der niedrigere mit zwei Strichen gekennzeichnet.

Durch Umformen erhält man:

$$\begin{aligned}\bar{\nu} &= T'_{el} - T''_{el} + G'(v') - G''(v'') + F'(J') - F''(J'') \\ &= \Delta T_{el} + \Delta G + \Delta F\end{aligned}$$

Im Allgemeinen gilt:

$$\Delta T_{el} > \Delta G > \Delta F$$

mit:

$$\begin{aligned}T_{el} &= \frac{E_{el}}{hc} \\ G(v) &= \frac{E_{vib}(v)}{hc} \\ F(J) &= \frac{E_{rot}(J)}{hc}\end{aligned}$$

Die Rotationsterme werden im Folgenden wegen der geringen Auflösung des Gerätes nicht weiter betrachtet.

Für kleine Schwingungsamplituden gilt näherungsweise das Hookesche Gesetz. Damit gilt für die Schwingungsterme:

$$\begin{aligned}
 G(v) &= \bar{\nu}_e \left(v + \frac{1}{2} \right) && ; v = 0, 1, 2, \dots \\
 \text{mit: } \bar{\nu}_e &= \left(\frac{1}{2\pi c} \right) \cdot \sqrt{\frac{k}{m_r}} \\
 m_r &= \text{reduzierte Masse} \\
 k &= \text{Kraftkonstante}
 \end{aligned}$$

Ein besserer Ansatz zur Beschreibung der Schwingungsenergie eines zweiatomigen Moleküls ist das sogenannte Morsepotential, ein empirischer Ansatz, welcher die Abhängigkeit der potentiellen Energie V von der Auslenkung aus der Ruhelage eines anharmonischen Oszillators darstellt.

$$\begin{aligned}
 V(r) &= D_e \left[1 - e^{-\beta(r-r_e)} \right]^2 \\
 \text{mit: } \beta &= 2\pi\nu_e \sqrt{\frac{m_r}{2D_e}}
 \end{aligned}$$

(r_e : Gleichgewichtsabstand, D_e : Dissoziationsenergie, ν_e : Schwingungsfrequenz des harm. Oszillators)

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung für die Schwingung im Morsepotential ergibt:

$$\begin{aligned}
 G(v) &= \bar{\nu}_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - x_e \bar{\nu}_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \\
 \text{mit der Anharmonizitätskonstante } x_e &= \frac{\bar{\nu}_e}{4D_e} ; \left(\bar{D}_e = \frac{D_e}{hc} \right)
 \end{aligned}$$

Zu verschiedenen Elektronenzuständen gehören verschiedene Potentialkurven und verschiedene ν_e , D_e und r_e -Werte. Für die Wellenzahl eines mit Änderung der Schwingungsenergie gekoppelten Elektronenübergangs gilt:

$$\begin{aligned}
 \bar{\nu}_{(v'' \rightarrow v')} &= \frac{\Delta E_{el}}{hc} + G'(v') - G''(v'') \\
 &= \Delta T_{el} + \bar{\nu}'_e \cdot \left[\left(v' + \frac{1}{2} \right) - x'_e \left(v' + \frac{1}{2} \right)^2 \right] - \bar{\nu}''_e \cdot \left[\left(v'' + \frac{1}{2} \right) - x''_e \left(v'' + \frac{1}{2} \right)^2 \right]
 \end{aligned}$$

Da ein reiner Elektronenterm nicht auftritt, sondern immer der $v = 0$ entsprechende Schwingungszustand die unterste Energiestufe darstellt, wird die Nullpunktenergie der Schwingung zu ΔT_{el} hinzugenommen, und man erhält schließlich:

$$\begin{aligned}
 \bar{\nu}_{(v'' \rightarrow v')} &= \bar{\nu}_{el} + \bar{\nu}'_e \cdot [(1 - x'_e)v' - x'_e v'^2] - \bar{\nu}''_e \cdot [(1 - x''_e)v'' - x''_e v''^2] \\
 \text{mit: } \bar{\nu}_{el} &= \Delta T_{el} + \bar{\nu}'_e \cdot \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{4}x'_e \right) - \bar{\nu}''_e \cdot \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{4}x''_e \right) \\
 \text{oder: } \bar{\nu}_{(v'' \rightarrow v')} &= \bar{\nu}_{el} + [a'v' - b'v'^2] - [a''v'' - b''v''^2] \\
 \text{mit: } a &= \bar{\nu}'_e(1 - x_e) \\
 b &= \bar{\nu}'_e x_e
 \end{aligned}$$

Bei einer merklichen Besetzung höherer Schwingungsniveaus können außer den Banden für Übergänge $0 \rightarrow v'$ auch weitere Banden ($1 \rightarrow v'$, $2 \rightarrow v'$) auftreten. Die entsprechenden Bandensysteme bezeichnet man als v'' Progressionen.

Versuch:

Das rechnergesteuerte UV/VIS-Spektrometer wurde zuerst in einem internen Selbsttest abgeglichen. Zur Messung wurde eine mit Ioddampf gefüllte Küvette in den Meß- und eine leere Küvette in den Vergleichsstrahl gebracht. Es wurde das Spektrum von Iod viermal aufgenommen und durch den Rechner gemittelt (siehe Ausdruck 1 und 2).

Auswertung:

Die Lage der Bandenkanten wurde anhand der Minima der zweiten Ableitung des Spektrums, die durch den Computer berechnet wurden, bestimmt (siehe Ausdruck 3). Überzählige Minima, die offensichtlich keiner Bandenkante entsprachen, wurden aus der Auswertung genommen. Die Bandenkanten wurden anschließend den einzelnen Progressionen zugeordnet.

Für die $v'' = 0$ Progression wurden die Wellenzahldifferenzen benachbarter Banden berechnet und über einem willkürlich gewählten Laufindex n graphisch aufgetragen.

Für die Differenzen benachbarter Übergänge gilt mit $v'' = 0$:

$$\Delta\bar{\nu}_{v'} = \bar{\nu}_{(0 \rightarrow v'+1)} - \bar{\nu}_{(0 \rightarrow v')} = (a' - b') - 2b'v'$$

Die resultierende Gerade hat folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} \Delta\bar{\nu}_n &= (a' - b') - 2b'(v'_0 + n) = A - Bn \\ \text{mit: } a &= a' - b'(1 + 2v'_0) \\ B &= 2b' \end{aligned}$$

Dabei erhielt die erste ausgemessene Bande (mit kleinster Wellenzahl und Quantenzahl v'_0) den Laufindex $n = 0$, d. h. $v' = v'_0 + n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$).

 $v'' = 0$ Progression

Nummernindex N	Wellenlänge in nm	Wellenzahl in cm^{-1}	Wellenzahldiff. in cm^{-1}
0	574,00	17421,6	96,1
1	570,85	17517,7	94,1
2	567,80	17611,8	93,5
3	564,80	17705,4	93,0
4	561,85	17798,3	92,3
5	558,95	17890,7	91,7
6	556,10	17982,4	87,7
7	553,40	18070,1	85,3
8	550,80	18155,4	82,8
9	548,30	18238,2	80,2
10	545,90	18318,4	79,2
11	543,55	18397,6	78,2
12	541,25	18475,8	75,4
13	539,05	18551,2	74,3
14	536,90	18625,4	73,1
15	534,80	18698,6	68,4

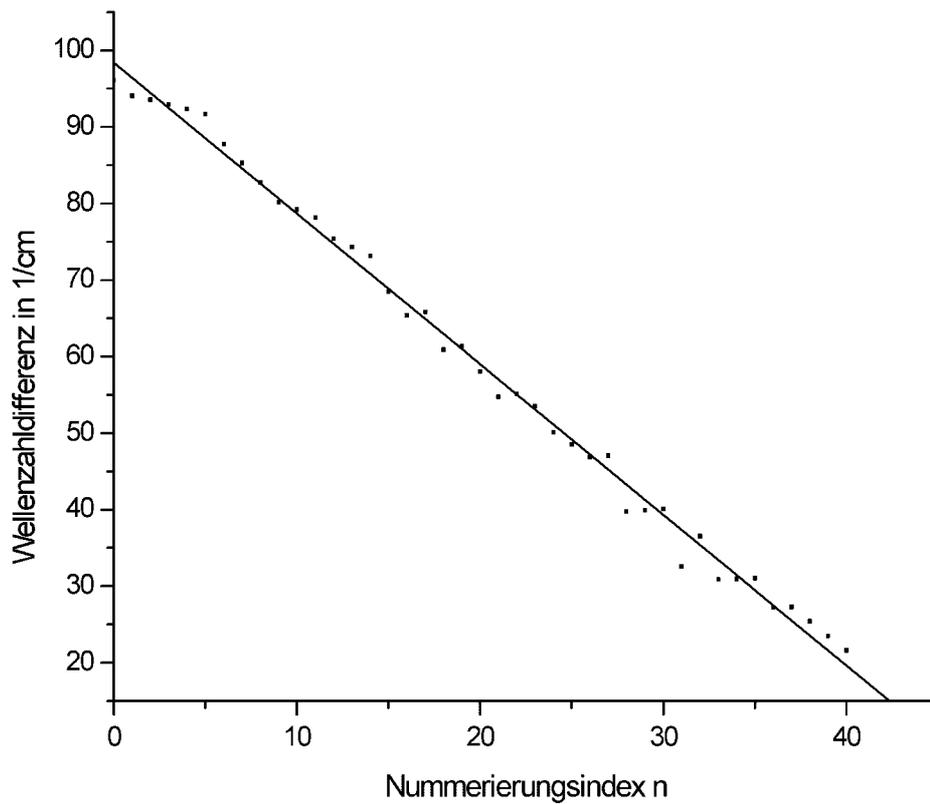
Nummernindex N	Wellenlänge in nm	Wellenzahl in cm^{-1}	Wellenzahldiff. in cm^{-1}
16	532,85	18767,0	65,4
17	531,00	18832,4	65,8
18	529,15	18898,2	60,9
19	527,45	18959,1	61,3
20	525,75	19020,4	58,1
21	524,15	19078,5	54,8
22	522,65	19133,3	55,1
23	521,15	19188,3	53,5
24	519,70	19241,9	50,1
25	518,35	19292,0	48,5
26	517,05	19340,5	46,9
27	515,80	19387,4	47,1
28	514,55	19434,5	39,7
29	513,50	19474,2	39,9
30	512,45	19514,1	40,1
31	511,40	19554,2	32,6
32	510,55	19586,7	36,5
33	509,60	19623,2	30,9
34	508,80	19654,1	31,0
35	508,00	19685,0	31,0
36	507,20	19716,1	27,2
37	506,50	19743,3	27,3
38	505,80	19770,7	25,4
39	505,15	19796,1	23,5
40	504,55	19819,6	21,6
	504,00	19841,3	

$v'' = 1$ Progression

Nummernindex N	Wellenlänge in nm	Wellenzahl in cm^{-1}	Wellenzahldiff. in cm^{-1}
0	581,25	17204,3	109,0
1	577,59	17313,3	87,1
2	574,70	17400,4	94,4
3	571,60	17494,8	92,3
4	568,60	17587,1	90,2
5	565,70	17677,2	87,9
6	562,90	17765,1	88,8
7	560,10	17854,0	86,5
8	557,40	17940,4	85,7
9	554,75	18026,1	81,6
10	552,25	18107,7	77,4
11	549,90	18185,1	78,0
12	547,55	18263,2	78,7
	545,20	18341,9	

$v'' = 2$ Progression

Nummernindex N	Wellenlänge in nm	Wellenzahl in cm^{-1}	Wellenzahldiff. in cm^{-1}
0	615,05	16258,8	106,4
1	611,05	16365,3	103,8
2	607,20	16469,0	106,5
3	603,30	16575,5	106,5
4	599,45	16682,0	107,8
5	595,60	16789,8	105,0
6	591,90	16894,7	101,9
7	588,35	16996,7	91,5
8	585,20	17088,2	96,9
9	581,90	17185,1	96,5
10	578,65	17281,6	94,6
11	575,50	17376,2	92,6
12	572,45	17468,8	88,9
	569,55	17557,7	



Auftragung der $v'' = 0$ Progression

Durch eine lineare Regression erhält man den Achsenabschnitt $A = 98,355 \text{ cm}^{-1}$ und die Steigung $B = 1,967 \text{ cm}^{-1}$.

Für die Wellenzahl des Grenzüberganges gilt mit $\bar{\nu}_0 = 17421,603 \text{ cm}^{-1}$:

$$\bar{\nu}_{n_{max}} = \bar{\nu}_0 + \frac{A}{2} \left(\frac{A}{B} + 1 \right) = 19929,781 \text{ cm}^{-1}$$

Da bei optisch angeregter Dissoziation das Iod-Molekül in ein sich im Grundzustand befindliches Atom und ein angeregtes Iod-Atom zerfällt, gilt für die Dissoziationsenergie:

$$\bar{D}_0'' = \bar{\nu}_{n_{max}} - E(I^*) = 19929,781 \text{ cm}^{-1} - 7589 \text{ cm}^{-1} = 12340,781 \text{ cm}^{-1} \equiv 1,301 \text{ eV} \equiv 147,629 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

Aus der linearen Regression ergibt sich für $b' = \frac{B}{2} = 0,984 \text{ cm}^{-1}$. Als Literaturangabe war gegeben, daß die Bande bei 534,8 nm zu dem Übergang $v' = 30 \leftarrow v'' = 0$ gehört. Daraus ließ sich v'_0 , die Bande mit der kleinsten Wellenzahl berechnen. Mit Kenntnis der Quantenzahl $v'_0 = 15$ ergibt sich für a' :

$$a' = A + b'(1 + 2v'_0) = 128,844 \text{ cm}^{-1}$$

Daraus lassen sich die Konstanten $\bar{\nu}'_e$, x'_e , D'_0 des angeregten Zustandes berechnen:

$$\begin{aligned} \bar{\nu}'_e &= a' + b' = 129,83 \text{ cm}^{-1} \\ x'_e &= \frac{b'}{a'+b'} = 0,00758 \\ \bar{\nu}_{(0 \rightarrow 0)} &= \bar{\nu}_{(0 \rightarrow v'_0)} - (a'v'_0 - b'v'^2_0) = 15710,34 \text{ cm}^{-1} \\ D'_0 &= \bar{\nu}_{n_{max}} - \bar{\nu}_{(0 \rightarrow 0)} = 4219,44 \text{ cm}^{-1} \equiv 0,523 \text{ eV} \equiv 50,48 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \end{aligned}$$

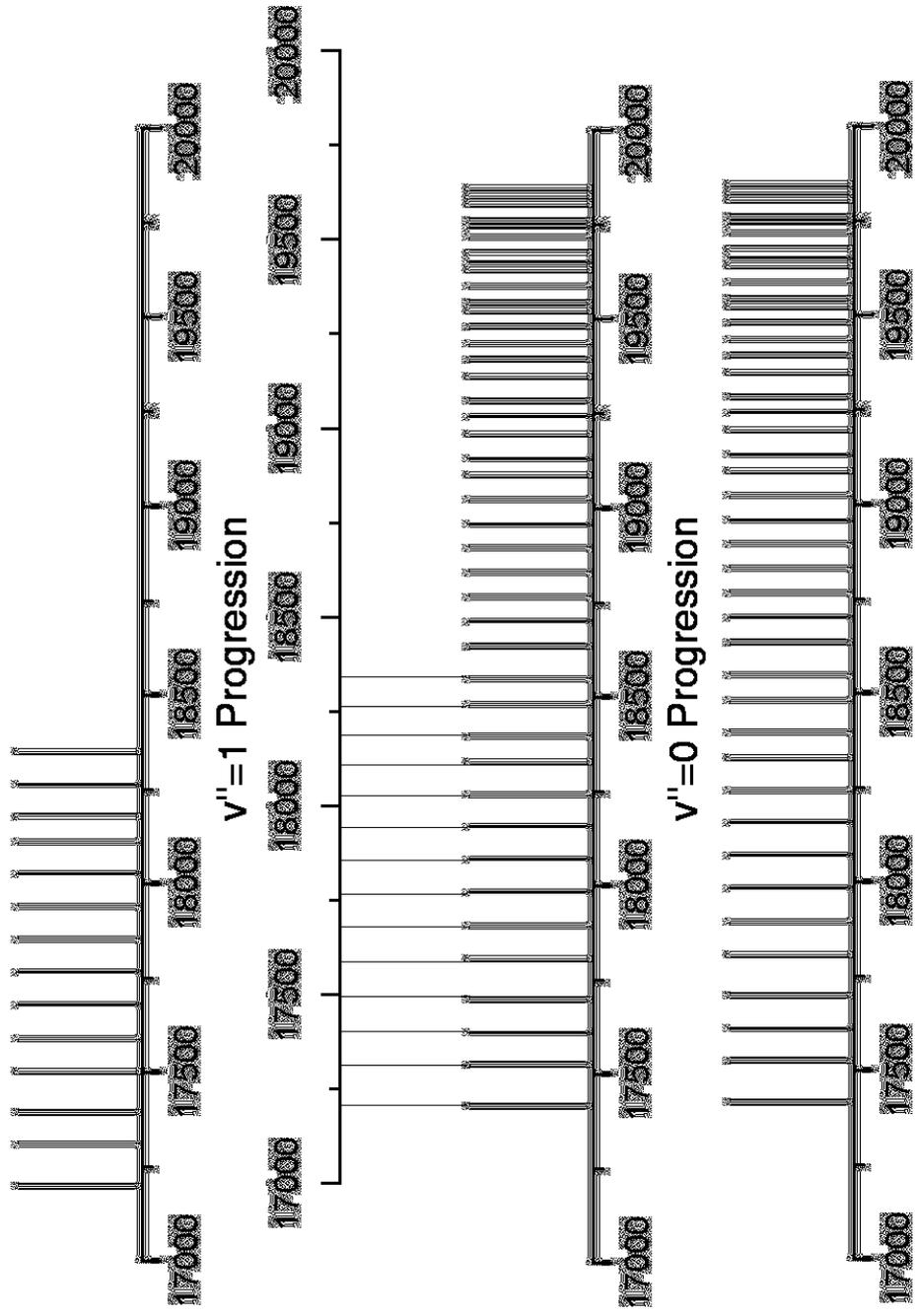
Es wurden Strichspektren der $v'' = 0$ und $v'' = 1$ Progressionen aufgetragen und durch Verschiebung auf Deckungsgleichheit gemeinsame v' -Schwingungszustände festgestellt. Dabei ergab sich, daß die Übergänge mit $n = 2$ bis 11 der ersten Progression und die $n = 2$ bis 11 der nullten Progression gemeinsame v' -Schwingungszustände besitzen. Aus dem Mittelwert der Wellenzahldifferenz zu gleichem v' ergibt sich die Termdifferenz:

$$G''(v'' = 1) - G''(v'' = 0) = \Delta G''(1 - 0) = \bar{\nu}''_e - 2\bar{\nu}''_e x''_e$$

Wellenzahl $\nu''=0$ im cm^{-1}	Wellenzahl $\nu''=1$ im cm^{-1}	Differenz in cm^{-1}
17611,8	17400,4	211,5
17705,4	17494,8	210,6
17798,3	17587,1	211,3
17890,7	17677,2	213,5
17982,4	17765,1	217,2
18070,1	17854,0	216,2
18155,4	17940,4	215,0
18238,2	18026,1	212,1
18318,4	18107,7	210,6
18397,6	18185,1	212,4

Es ergibt sich der Mittelwert $\Delta\Delta\bar{\nu} = \Delta G''(1 - 0) = 213,034 \text{ cm}^{-1}$

Strichspektren der $v''=0$ und $v''=1$ Progressionen



Da $\Delta G''(1-0) \approx \Delta G''(2-1)$ ist, lassen sich die Übergänge der $v''=1$ und $v''=2$ -Progression zu gleichem v' leicht zuordnen und ein Mittelwert für die Termdifferenz $\Delta G''(2-1)$ berechnen.

Wellenzahl $\nu''=1$ im cm^{-1}	Wellenzahl $\nu''=2$ im cm^{-1}	Differenz in cm^{-1}
17204,3	16996,7	207,6
17313,3	17088,2	(225,1) aus der Wertung genommen
17400,4	17185,1	215,3
17494,8	17281,6	213,1
17587,1	17376,2	210,9
17677,2	17468,8	208,4
17765,1	17557,7	207,4

Es ergibt sich der Mittelwert $\Delta\bar{\nu} = \Delta G''(2-1) = 210,453cm^{-1}$

Daraus lassen sich die Konstanten $\bar{\nu}_e''$ und x_e'' des Grundzustandes berechnen.

$$\begin{aligned}\Delta G(0 \rightarrow 1) &= \bar{\nu}_e'' - 2x_e''\bar{\nu}_e'' \\ \Delta G(1 \rightarrow 2) &= \bar{\nu}_e'' - 4x_e''\bar{\nu}_e''\end{aligned}$$

Man erhält:

$$\begin{aligned}\bar{\nu}_e'' &= 2\Delta G(0 \rightarrow 1) - \Delta G(1 \rightarrow 2) = 215,615cm^{-1} \\ x_e'' &= \frac{\Delta G(0 \rightarrow 1) - \Delta G(1 \rightarrow 2)}{2\bar{\nu}_e''} = 0,00599\end{aligned}$$

Das Morsepotential wird durch folgende Formel beschrieben:

$$V(r) = D_e \left[1 - e^{-\beta(r-r_e)} \right]^2$$

Führt man eine Reihenentwicklung durch und bricht nach dem linearen Glied ab, so ergibt sich für das Potential:

$$V(r) = D_e \beta^2 r^2$$

Ein Vergleich mit dem harmonischen Oszillator liefert: $\frac{1}{2}k = D_e \beta^2$ oder mit $\nu_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m_r}}$:

$$\beta = 2\pi\nu_e \sqrt{\frac{m_r}{2D_e}}$$

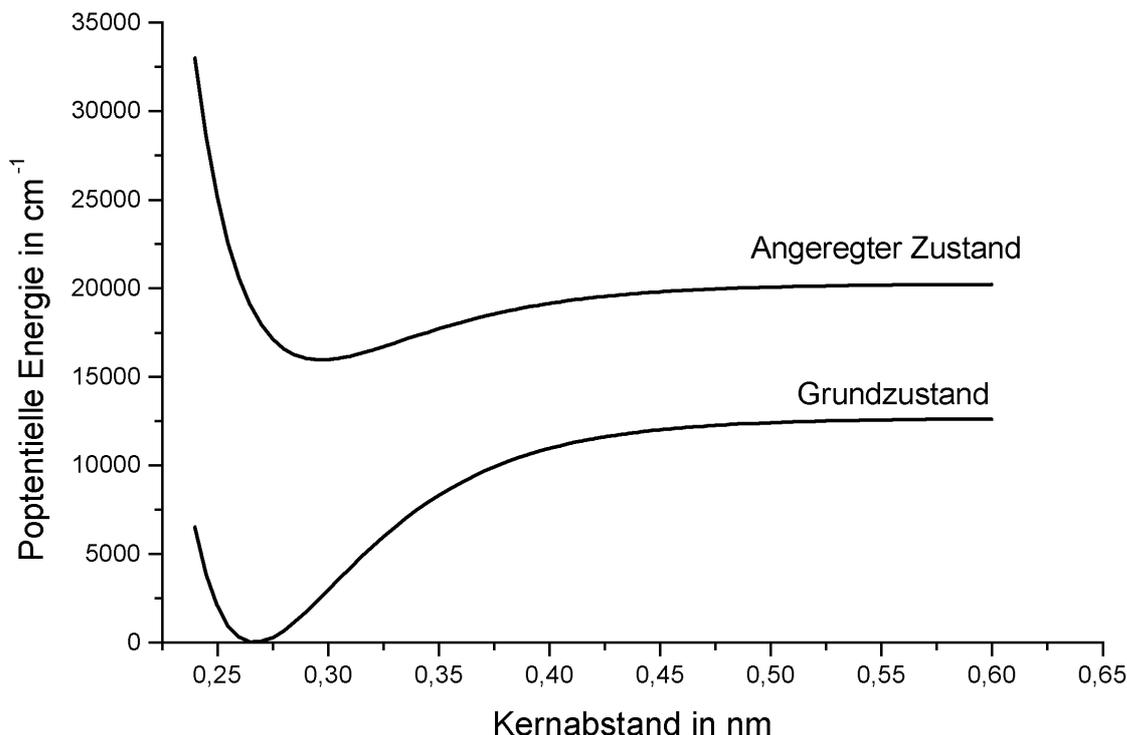
D_e wird berechnet durch:

$$\begin{aligned}\bar{D}_e &= \bar{D}_0 + \frac{1}{2}\bar{\nu}_e - \frac{1}{4}\bar{\nu}_e'' x_e'' \\ &(\text{oder } \bar{D}_e = \frac{\bar{\nu}_e}{4x_e})\end{aligned}$$

Es waren die Gleichgewichtsabstände gegeben: $r_e' = 0,297nm$, $r_e'' = 0,267nm$

Für das Morse-Potential ergeben sich folgende Parameter:

$$\begin{aligned}D_e' &= 4281,992cm^{-1} & D_e'' &= 12635,165cm^{-1} \\ \beta' &= 1,925 \cdot 10^8 cm^{-1} & \beta'' &= 2,204 \cdot 10^8 cm^{-1}\end{aligned}$$



Zu berechnen sind die relativen Besetzungen der Schwingungsniveaus $v'' = 0, 1$ und 2 durch eine Boltzmann-Verteilung. Die Temperatur beträgt $T = 298$ K. Es gilt dann:

$$\frac{N_i}{N_j} = \frac{e^{-\frac{E_i}{kT}}}{\frac{E_j}{e^{kT}}} = e^{\frac{E_j - E_i}{kT}}$$

$$E_j - E_i = hc\Delta G(i \rightarrow j)$$

Daraus folgt für das Verhältnis der Besetzungen:

$$\frac{N_0}{N_1} = 2,798 \quad \frac{N_1}{N_2} = 2,764$$

Das Verhältnis der Besetzungszahlen N_0 , N_1 und N_2 ist also $1 : 0,3574 : 0,1293$.

Bei der Aufnahme eines Schwingungs- oder Elektronenspektrums in der Gasphase mit einem hochauflösenden Spektrometer stellt man fest, daß jede Absorptionsbande aus einer großen Anzahl von Bandenlinien, die zu Übergängen einzelner Rotationsenergieniveaus gehören, besteht. Die Energieniveaus eines starren linearen Rotators mit der Quantenzahl J lassen sich berechnen durch:

$$E = chBJ(J + 1) \text{ mit } B = \frac{h}{8\pi^2cI}$$

Aus quantenmechanischen Überlegungen ergeben sich für die möglichen Änderungen der Rotationsquantenzahl in Elektronenspektren die Auswahlregeln $\Delta J = -1, +1$. Man erhält zwei Gruppen von Rotationsbanden, die als P- und R-Zweig bezeichnet werden. Da sich bei der Schwingungsanregung die Bindungsabstände ändern, ändert sich das Trägheitsmoment und damit die

Rotationskonstante B . Damit ergibt sich für die Änderung der Wellenzahl aufgrund der Rotationsfeinstruktur innerhalb einer Schwingungsbande:

$$\bar{\nu}_{rot} = B' J'(J' +) - B'' J''(J'' +)$$

Für den P-Zweig ($\Delta J = -1$) gilt:

$$\bar{\nu}_{rot} = -(B' + B'')J'' + (B' - B'')J''^2$$

Für den R-Zweig ($\Delta J = +1$) gilt:

$$\bar{\nu}_{rot} = 2B' + (3B' + B'')J'' + (B' - B'')J''^2$$

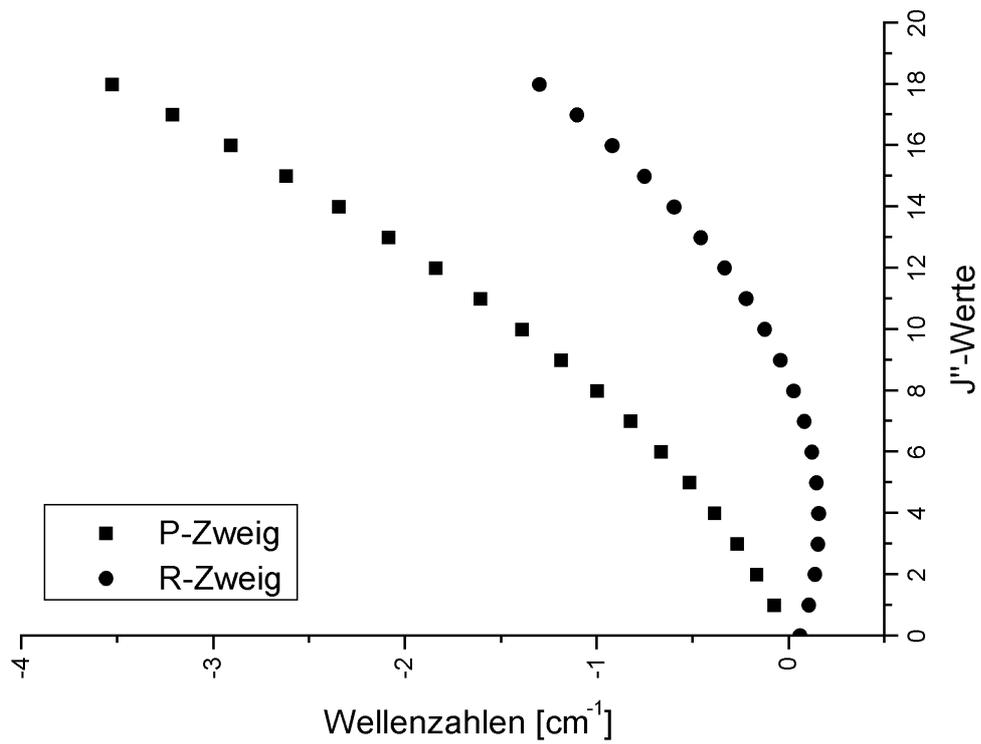
Mit den gegebenen Gleichgewichtsabständen $r'_e=0,297$ nm und $r''_e=0,267$ nm ergeben sich für die Rotationskonstanten die folgenden Werte:

$$B' = 0,03012 \text{ cm}^{-1}$$

$$B'' = 0,03726 \text{ cm}^{-1}$$

Damit ergeben sich folgende Werte für das Fortrat-Diagramm:

J'' -Werte	P-Zweig $\bar{\nu}_{rot}$ in cm^{-1}	R-Zweig $\bar{\nu}_{rot}$ in cm^{-1}
0		0,06024
1	-0,07452	0,1062
2	-0,16332	0,13788
3	-0,2664	0,15528
4	-0,38376	0,1584
5	-0,5154	0,14724
6	-0,66132	0,1218
7	-0,82152	0,08208
8	-0,996	0,02808
9	-1,18476	-0,0402
10	-1,3878	-0,12276
11	-1,60512	-0,2196
12	-1,83672	-0,33072
13	-2,0826	-0,45612
14	-2,34276	-0,5958
15	-2,6172	-0,74976
16	-2,90592	-0,918
17	-3,20892	-1,10052
18	-3,5262	-1,29732



Die Werte des P-Zweiges liegen vom ersten Wert an im negativen Bereich der Wellenzahldifferenz $\bar{\nu}_{rot}$. Der R-Zweig hingegen strebt zuerst in den positiven Bereich, bis das quadratische Glied im Ausdruck für den R-Zweig das lineare übertrifft. Dann kehrt sich die Richtungstendenz um und der Zweig strebt ebenfalls ins Negative. In diesem Bereich des Spektrums kommt es durch Linienhäufung zur Ausbildung eines Bandenkopfes.

Fehlerbetrachtung:

Da das Spektrum rechnergesteuert aufgenommen wurde, kann man davon ausgehen, daß die Werte der Wellenzahlen im Rahmen der Ausgabe fehlerfrei sind.

Fehler bei der Bestimmung der Dissoziationsenergie:

Die Fehler für A und B der Regressionsgerade $A + B \cdot x$:

$$A = 98,355 \pm 0,5359 \text{ cm}^{-1}$$
$$B = 1,967 \pm 0,0231 \text{ cm}^{-1}$$

Für die Grenzwellenzahl $\bar{\nu}_{n_{max}}$ gilt:

$$\bar{\nu}_{n_{max}} = \bar{\nu}_0 + \frac{A}{2} \left(\frac{A}{B} + 1 \right)$$

Der Fehler ergibt sich zu:

$$\Delta \bar{\nu}_{n_{max}} = \Delta \bar{\nu}_0 + \left| \frac{\partial \Delta \bar{\nu}_{n_{max}}}{\partial A} \right| \Delta A + \left| \frac{\partial \Delta \bar{\nu}_{n_{max}}}{\partial B} \right| \Delta B = \Delta \bar{\nu}_0 + \left| \frac{A}{B} + \frac{1}{2} \right| \Delta A + \left| -\frac{A^2}{2B^2} \right| \Delta B$$

Damit ergibt $\Delta \bar{\nu}_{n_{max}} = 55,94 \text{ cm}^{-1}$. Dies entspricht einem Fehler von 0,28%.

Für die Dissoziationsenergie \bar{D}_0'' gilt:

$$\bar{D}_0'' = \bar{\nu}'_{n_{max}} - E(I^*)$$

Die Anregungsenergie war gegeben und wird daher als fehlerfrei angenommen.

$$\frac{\Delta \bar{D}_0''}{\bar{D}_0''} = \left| \frac{\partial \bar{D}_0''}{\partial \bar{\nu}'_{n_{max}}} \right| \cdot \frac{\Delta \bar{\nu}'_{n_{max}}}{\bar{\nu}'_{n_{max}}} = \frac{\Delta \bar{\nu}'_{n_{max}}}{\bar{\nu}'_{n_{max}}} = 0,28\% \text{ bzw. } \Delta \bar{D}_0'' = 34,55 \text{ cm}^{-1}$$

Fehler bei der Bestimmung der Daten für den angeregten Zustand:

Fehler von $b' = \frac{B}{2}$:

$$\frac{\Delta b'}{b'} = \frac{\Delta B}{B} = 1,17\% \text{ bzw. } \Delta b' = 0,0116 \text{ cm}^{-1}$$

Fehler von $a' = A + b'(1 + 2v'_0)$:

$$\Delta a' = \Delta A + (1 + 2v'_0) \Delta b' a' = 0,8955 \text{ cm}^{-1} \equiv 0,70\%$$

Fehler von $\bar{\nu}'_e = \Delta a' + \Delta b'$

$$\bar{\nu}'_e = 129,83 \pm 0,907 \text{ cm}^{-1}$$

Fehler von $x'_e = \frac{b'}{\bar{\nu}'_e}$:

$$\Delta x'_e = \left| \frac{1}{\bar{\nu}'_e} \right| \Delta b' + \left| -\frac{b'}{(\bar{\nu}'_e)^2} \right| \Delta \bar{\nu}'_e$$
$$x'_e = 0,00758 \pm 1,4316 \cdot 10^{-4} \equiv 1,89\%$$

Fehler von $\bar{\nu}_{(0 \rightarrow 0)}$:

Es kann davon ausgegangen werden, daß ν'_0 und $\bar{\nu}_{(0 \rightarrow \nu_0)}$ fehlerfrei sind:

$$\begin{aligned}\Delta \bar{\nu}_{0 \rightarrow 0} &= \Delta a' + \Delta b' \\ \Delta \bar{\nu}_{(0 \rightarrow 0)} &= 0,9071 \text{cm}^{-1} \equiv 0,005\%\end{aligned}$$

Fehler von \bar{D}'_0 :

$$\Delta \bar{D}'_0 = \Delta \bar{\nu}_{n_{max}} + \Delta \bar{\nu}_{(0 \rightarrow 0)} = 56,85 \text{cm}^{-1} \equiv 1,33\%$$

Fehler bei der Bestimmung der Daten für den Grundzustand:

Fehler von $\Delta G''(1-0)$ und $\Delta G''(2-1)$:

$$\begin{aligned}\text{Standardabweichung } \Delta \Delta G''(1-0) &= 2,356 \\ \text{Standardabweichung } \Delta \Delta G''(2-1) &= 3,237\end{aligned}$$

Fehler von $\bar{\nu}''_e$:

$$\Delta \bar{\nu}''_0 = 2 \Delta \Delta G''_{1-0} + \Delta \Delta G''_{2-1} = 7,928 \text{cm}^{-1} \equiv 3,68\%$$

Fehler von x''_e :

$$\Delta x''_e = \left| \frac{1}{2\bar{\nu}''_e} \right| \Delta \Delta G''_{1-0} + \left| -\frac{1}{2\bar{\nu}''_e} \right| \Delta \Delta G''_{2-1} + \left| -\frac{\Delta G''_{1-0} - \Delta G''_{2-1}}{2\bar{\nu}''_e{}^2} \right| \Delta \bar{\nu}''_e = 0,01501 \equiv 251\%$$

Fehler bei der Berechnung des Morse-Potentials:

Fehler von \bar{D}_e :

$$\begin{aligned}\frac{\Delta \bar{D}'_e}{D_e} &= \frac{\Delta \bar{\nu}_e}{\bar{\nu}_e} + \frac{\Delta x_e}{x_e} \\ \frac{\Delta \bar{D}'_e}{D_e} &= 1,90\% \\ \frac{\Delta \bar{D}'_e}{D_e} &= 251\%\end{aligned}$$

Fehler von β :

$$\frac{\Delta \beta}{\beta} = \frac{\Delta \bar{\nu}_e}{\bar{\nu}_e} + \frac{1}{2} \frac{\Delta \bar{D}_e}{D_e}$$

Der Fehler von β' beträgt 1,66 %, der von β'' 126 %.