

Ramaneffekt

Moritz Bubek, Andrej Grimm
bubek@gmx.de, andrej.grimm@uni-konstanz.de

29. September 2004

Als Ramaneffekt bezeichnet man das Auftreten von mehr Linien im Streulicht als im eingestrahlten Licht. Bestrahlt man eine Substanz mit einer Lichtquelle, so sieht man im gestreuten Licht nicht nur die unverschobenen Rayleigh-Linien, sondern noch weitere Linien, die eine Frequenzverschiebung gegenüber den Erregerlinien zeigen. Diese nennt man Raman-Linien, da ihre Entdeckung von dem indischen Physiker C.V.Raman im Jahre 1928 als erstem publiziert wurden.

1 Theoretische Grundlagen

1.1 Streuung und Polarisierbarkeit

Geht ein Molekül durch den Stoß mit einem Lichtquant aus dem Energiezustand E_n in den Zustand E_k über, so kann man drei Fälle unterscheiden:

1. $E_n > E_k$: Das Molekül ist nach dem Stoß in einem höheren Energiezustand. Folglich ist das Streulicht energieärmer geworden, es hat also eine größere Wellenlänge. Diese nach rot verschobenen Linien heißen "Stokes-Linien"
2. $E_n = E_k$: Das Molekül hat vor und nach dem Stoß den gleichen Energiezustand. Der Stoß ist also rein elastisch. Das Streulicht hat eine unveränderte Wellenlänge, somit treten keine verschobenen Linien auf. Diese elastische Streuung nennt man "Rayleigh"-Streuung.
3. $E_n < E_k$: Das Molekül ist nach dem Stoß in einem niedrigeren Energiezustand. Das Molekül hat dem stoßenden Lichtquant einen Teil seiner Energie mitgegeben. Nun hat das Streulicht eine kleinere Wellenlänge, d.h. sie sind nach blau verschoben. Man nennt diese Linien "Anti-Stokes-Linien". Diese sind meist weniger intensiv, da sie nur auftreten, wenn sich das Molekül vor dem Stoß in einem angeregten Zustand befindet und daher über die thermodynamische Statistik eine geringere Wahrscheinlichkeit hat.

1.2 Klassische Behandlung

Frequenzverschiebung der Streuung kann aus folgenden Annahmen berechnet werden:

Ein elektrischer Feldvektor einer Lichtwelle $E = E_0 \cos(\omega t)$ trifft auf ein Molekül und induziert das Dipolmoment $P(t) = \alpha E$ wobei α die Polarisierbarkeit des Moleküls ist. Diese hängt von den Abständen der Kerne zu diesem Zeitpunkt ab. Die Polarisierbarkeit hängt von der aktuellen Koordinate q_i der Schwingungsbewegung des Moleküls ab und ist somit als $\alpha = \alpha(q_i)$ schreibbar. Für kleine Auslenkungen q_i kann man die Polarisierbarkeit nach q_i um die Gleichgewichtslage $q_i = 0$ als Taylorreihe entwickeln: $\alpha(q_i) = \alpha_0 + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q_i}\right)_0 q_i + \dots$. Setzen wir noch die Voraussetzung $q_i = q_{i0} \cos(\omega_i t + \delta_i)$ ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned}
P(t) = & \underbrace{\alpha_0 E_0 \cos(\omega t)}_{\text{Rayleigh}} + \\
& + \underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q_i} \right)_0 E_0 q_{i0} \cos((\omega - \omega_i) t + \delta_i)}_{\text{Stokes}} + \\
& + \underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q_i} \right)_0 E_0 q_{i0} \cos((\omega + \omega_i) t + \delta_i)}_{\text{Anti-Stokes}}
\end{aligned}$$

Infolge der Modulation der Schwingungen des induzierten Dipolmoments mit den Kernschwingungen treten im Streulicht also die Frequenzen $\omega - \omega_i$ und $\omega + \omega_i$ auf. Außerdem können in den Spektren auch Linearkombinationen der Eigenfrequenzen als Ramanlinien auftreten.

Bei einem isotropen Molekül ist die Polarisierbarkeit α richtungsunabhängig und ist somit eine skalare Größe. Bei anisotropen Molekülen ist sie von der jeweiligen Richtung im Molekül abhängig, die Rechnungen oben müssen dann mit α als Tensor durchgeführt werden.

1.3 Rotationsramaneffekt

Da Moleküle in einem Gas auch um ihre eigenen Achsen rotieren können, zeigen sich im Streulicht außer der Erregerlinie und den Linien des Schwingungsramaneffektes noch Linien, die der Summen- und Differenzfrequenz von Licht- und Rotationsfrequenz entsprechen. Quantenmechanisch entspricht dies einfach dem Übergang in ein anderes Rotationsniveau, während das Photon absorbiert wird. Dieser Effekt kommt nur bei nicht isotropen Molekülen vor.

1.4 Intensitätsverhältnisse

Die Intensitätsverhältnisse zwischen Stokes- und Antistokes-Linien ergeben sich aus den Besetzungswahrscheinlichkeiten η der Ausgangszustände, und diese kann man im thermischen Gleichgewicht mit der Boltzmannstatistik ausrechnen. Bei sinkender Temperatur nimmt die Intensität der Antistokes-Linie ab, weil der Antistokes-Prozeß ein Molekül im Anregungszustand voraussetzt, und mit sinkender Temperatur die Anzahl angeregter Moleküle abnimmt. Beim Rotationsramaneffekt sind Stokes- und Anti-Stokes gleich wahrscheinlich, da sich die Anregungsenergien der Rotationen im Bereich der thermischen Anregung liegen und deswegen genauso häufig besetzt wie die nicht angeregten. Mit einer Ramanfrequenz ω_r und einer Anregung ω_0 gilt bei Vibrationen für die Intensitäten P

$$\frac{P_{\text{Antistokes}}}{P_{\text{Stokes}}} = \left(\frac{\omega_0 - \omega_r}{\omega_0 + \omega_r} \right)^4 \cdot e^{\frac{\hbar \omega_{vib}}{k_B T}} \quad (1)$$

1.5 Klassifizierung von Molekülschwingungen

Mit Hilfe der Gruppentheorie kann man die Schwingungen von Molekülen nach ihren Symmetrien klassifizieren. Als Hauptachse eines Moleküls bezeichnet man dabei diejenige, die die höchste Drehsymmetrie hat (größtes n). Bei einer Drehspiegelung steht die Spiegelebene senkrecht zur Drehachse.

Symmetrieoperation	Symmetrieelement	Symbol
Identität E	ganzes Objekt	
Drehung um $\frac{360^\circ}{n}$	n -fache Symmetrieachse	C_n
Spiegelung	Symmetrieebene	σ
	parallel zur Hauptachse	σ_v
	senkrecht zur Hauptachse	σ_h
Inversion	Inversionszentrum	i
Drehspiegelung	Achse	S_n

Die Symmetrioperationen lassen sich zu Klassen zusammenfassen, so gibt es z.B. die Klasse der Drehungen und die Klasse der Spiegelungen. Um zu entscheiden, zu welcher Klasse eine Operation gehört, schaut man sich deren Matrixdarstellung an. Alle Symmetrioperationen, deren Charakter χ (Spur der Matrix) gleich ist, gehören zur selben Klasse.

Als Beispiel betrachten wir das C_{3v} -Molekül NH_3 , das aus 4 Atomen besteht, weshalb alle Symmetrioperationen durch 4×4 -Matrizen beschrieben werden können. Die Basis sei in dieser Darstellung durch s_N (entspricht der Position des N-Atoms) und s_A, s_B, s_C (entsprechen den Positionen der drei H-Atome) gegeben. Der Ort des N-Atoms bleibt bei allen Symmetrioperationen erhalten, also haben alle Matrizen die Form:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & & \\ 0 & \dots & & \\ 0 & \dots & & \end{pmatrix}$$

Die Basis läßt sich folglich in einen Teil, der nur aus s_N , und in einen, der aus s_A, s_B, s_C besteht, zerlegen. s_N ist dann die Basis der trivialen Darstellung, die anderen drei bilden die Basis einer dreidimensionalen Darstellung einer Gruppe, die aus sechs Matrizen besteht. Sei $D^{(l)}$ das Symbol für eine l -dimensionale Darstellung, dann können wir symbolisch schreiben [4]: $D^{(4)} = D^{(1)} + D^{(3)}$ $D^{(1)}$ heißt irreduzible Darstellung, weil sich diese eindimensionale Darstellung aus den sechs trivialen Matrizen 1,1,1,1,1 und 1 nicht weiter reduzieren läßt. $D^{(3)}$ ist reduzibel und kann durch eine geschickte Linearkombination von s_A, s_B und s_C in $D^{(3)} = D^{(1)} + D^{(2)}$ zerlegt werden. Alle irreduziblen Darstellungen einer Gruppe faßt man nun in einer Charaktertafel zusammen. Für NH_3 sieht sie so aus [4]:

$C_{3v}, 3m$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	$h = 6$	
A_1	1	1	1	z	$z^2, x^2 + y^2$
A_2	1	1	-1		
E	2	-1	0	(x, y)	$(xy, x^2 - y^2), (xz, yz)$

Über den Spalten stehen die Operationen und in der linken Spalte alle irreduziblen Darstellungen der Gruppe. Üblicherweise verwendet man den Buchstaben A für eindimensionale irreduzible Darstellungen, E für zweidimensionale und T für dreidimensionale. Dank einem Theorem der Gruppentheorie weiß man, daß die Anzahl der irreduziblen Darstellungen gleich der Anzahl der Klassen ist, folglich hat eine Charaktertafel immer gleich viele Zeilen wie Spalten.

Weiß man, in welcher Basis die irreduziblen Darstellungen gefunden wurden, dann kann man entscheiden, ob eine Normalschwingung IR- oder Raman-aktiv ist. Diese Information steht rechts in der Charaktertafel.

1.6 Raman-aktiv oder IR-aktiv?

Anhand von Auswahlregeln kann vorhergesagt werden, welche Schwingungen Infrarot- bzw. Raman-aktiv sind. Da bei der Wechselwirkung von Molekülen mit Photonen der Gesamtdrehimpuls im elektronischen Grundzustand konstant bleiben muß, können nur bestimmte Übergänge induziert werden. Ist die Symmetrieklasse einer Normalschwingung dieselbe wie x, y oder z , dann ist die Mode IR-aktiv. Ist sie wie die einer quadratischen Form z.B. xy oder x^2 , dann ist die Mode Raman-aktiv. In anderen Worten heißt das, daß IR-Aktivität vorliegt, wenn durch die Normalschwingung ein elektrisches Dipolmoment induziert wird und Raman-Aktivität, wenn sich durch die Normalschwingung die Polarisierbarkeit periodisch ändert.

Da beide Aktivitäten andere Auswahlregeln besitzen, erhält man über eine Probe oft nur durch die Kombination von beiden eine vollständige Information. Meist wird die Ramanspektroskopie nur bei wenig absorbierenden, nicht fluoreszierenden Substanzen eingesetzt, die am besten in wäßriger Lösung vorliegen. IR-Spektroskopie ist für wäßrige Lösungen nicht geeignet. Im IR-Spektrum erhält man oft störende Ober- und Kombinationsschwingungen. Diese sind für die Ramanspektroskopie zu schwach, weshalb das Raman-Spektrum übersichtlicher ausfällt. Außerdem bietet es

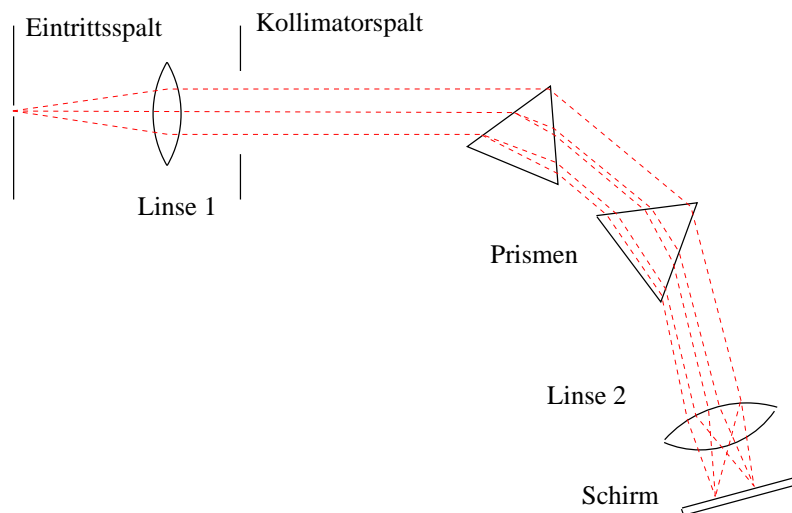


Abbildung 1: Schematischer Aufbau der fotografischen Messung, aus [3]

innerhalb einer Stoffklasse normalerweise gute Unterscheidungsmerkmale; IR-Spektren sind sich in diesem Fall zu ähnlich.

2 Experimenteller Aufbau und Durchführung

Im Versuch wird sowohl eine fotografische als auch eine elektronische Aufzeichnungsmethode benutzt. Der schematische Aufbau für die fotografische Aufzeichnung ist in Abbildung 2 dargestellt.

Der Lichtstrahl der Quelle, also der Laser wird so umgelenkt, daß er im 90 Grad Winkel zur Ausbreitungsebene des Ramanspektrometers in die Küvette einstrahlt, um den direkten Lichtstrahl aus Intensitätsgründen nicht in das Spektrometer gelangen zu lassen. Nach der Küvette, eine kleine Plexiglasbox mit der zu untersuchenden Flüssigkeit befindet sich ein Eintrittsspalt. Beim Füllen der Küvette ist darauf zu achten, daß sie weder Fingerabdrücke abbekommt noch Luftbläschen enthält, da dies alles zu zusätzlicher, störender Streuung führt. Der Eintrittsspalt dient der Intensitätsregelung und muß eben so weit geöffnet werden, daß man gute Bilder erhält. Bei zu kleinem Spalt wird die Intensität zu gering, bei zu großem Spalt überstrahlen sich die Linien. Das kollimierte Licht durchläuft die beiden Prismen, und die Linien werden dann von der Kameralinse auf die Photoplatte abgebildet. Der Vorteil der fotografischen Methode liegt in der Summation, d.h. daß man durch genügend lange Belichtungszeit auch schwächste Linien sichtbar machen kann.

Im Vergleich dazu hat die elektronische Aufzeichnung den Vorteil einer höheren Auflösung. Allerdings benötigt man hier eine wesentlich längere Meßdauer, da das ganze Spektrum durchfahren und nicht wie beim Photo auf einmal aufgenommen wird. Oft ergibt sich bei der elektronischen Methode auch das Problem, schwächere Linien von durch Störungen verursachten Peaks zu unterscheiden. In Abbildung 2 ist der Aufbau skizziert.

Für die elektronische Messung wird die Kamera durch einen beweglichen Spiegel ersetzt. Der reflektierte Strahl wird vor dem Eintrittsspalt ausgekoppelt und von einem zur Verringerung der Dunkelzählrate peltiergekühlten Photomultiplier registriert. Ein Motor bewegt den Spiegel so, daß das Spektrum mit konstanter Geschwindigkeit durchfahren wird. Bei der Einstellung der Instrumente ist darauf zu achten, den Photomultiplier nicht im Bereich seiner Sättigung zu betreiben, da sonst die Peaks abgeschnitten werden.

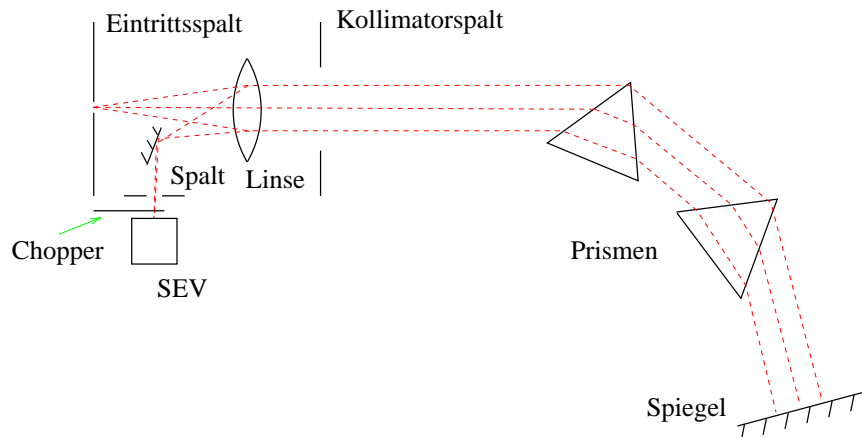


Abbildung 2: Schematischer Aufbau der photoelektrischen Messung, aus [3]

2.1 Datenerfassung

Die im Versuch aufgenommenen Spektren werden entweder photographisch auf einen Polaroidfilm oder mittels photoelektrischer Methoden mittels eines Schreibers auf Papier erfasst. Zur Auswertung haben wir die Spektren vom Papier eingescannt und mit dem Programm `g3data`¹ eingelesen, umso lästigem nachmessen mit dem Geodreieck auf dem Papier zu entgehen.

Auch die Photos haben wir mit einem 2400 dpi Scanner (Mittelerde) eingescannt und konnten so ebenfalls mit `g3data` ohne Mikroskop die Werte auslesen. Die Auflösung beim Scanner ist etwa 1/100 mm was mit der Ablesegenauigkeit des Meßschiebers übereinstimmt.

2.2 Laser

Im Versuch wird neben den zur Eichung benutzten Quecksilber- bzw Heliumdampf lampen ein Argon-Ionen Laser als Lichtquelle eingesetzt. Für die Spektroskopie benötigt man scharfe Linien, was durch einen Gaslaser besonders gut erfüllt wird. Der Ar^{3+} -Laser hat im sichtbaren Spektrum 8 Moden (457.9, 465.8, 472.7, 476.5, 488.0, 496.5, 501.7 und 514.5 nm), von denen 2 besonders bevorzugt sind (488 und 514). Bei uns sprang der Laser in die 476.5nm-Mode, was durch die Rayleigh-Linien der photographischen Spektren wiedergegeben wird. Am nächsten Tag hatten wir meißtens die 488 nm Mode, allerdings ist auch hier bei der CH_2Cl_2 -Messung wiederum eine andere Lasermode eingelockt, was durch das Ausschalten des Laser aufgrund des Verlusts des Hochspannungsgeräts erklärt werden kann (Fehlersuche). Alle photographischen Spektren sind mit der 476.5 nm Mode aufgenommen, CCl_4 und $CHCl_3$ sind in der photoelektrischen Meßmethode mit 488.0 nm und CH_2Cl_2 mit 472.7 nm.

¹<http://www.acclab.helsinki.fi/~frantz/software/g3data.php>

3 Ergebnisse

3.1 Kalibrierung

Als erstes wird die jeweilige Apperatur kalibriert. Dazu werden Spektren von Quecksilber bzw Heliumdampflampen verwendet, die über den kompletten sichtbaren Bereich aufgenommen werden. Die Lampen werden an die Stelle der Ramanküvette gestellt und sind mit einer zeitlich einstellbaren Blende verdeckt.

Anhand der bekannten[5] Linien dieser Spektren (Abbildung 6) kann eine Eichkurve erstellt werden, welche die Position auf dem Photo bzw auf dem Papier einer Wellenzahl zuordnet. Dieser Zusammenhang ist nicht linear, was unter anderem an verschiedenen Weglängen der verschiedenen Wellenlängen und an der nichtgekrümmten Oberfläche des Films liegt.

Für die photoelektrische Messung benutzen wir ein Quecksilberspektrum (Abbildung 3) zur Eichung, was uns zu der aus Abbildung 4 erhaltenen Eichkurve $k(R) = 26263 - 105R^2 - 143R$ führte. Diese gibt die Wellenzahl in Abhängigkeit des Widerstands des Potentiometers an, das zu Positionsbestimmung an den Spiegel gekoppelt ist. Mittels Eichmarken auf dem Papier wird dieser wiederum in Beziehung zur Position auf dem Papier gebracht.

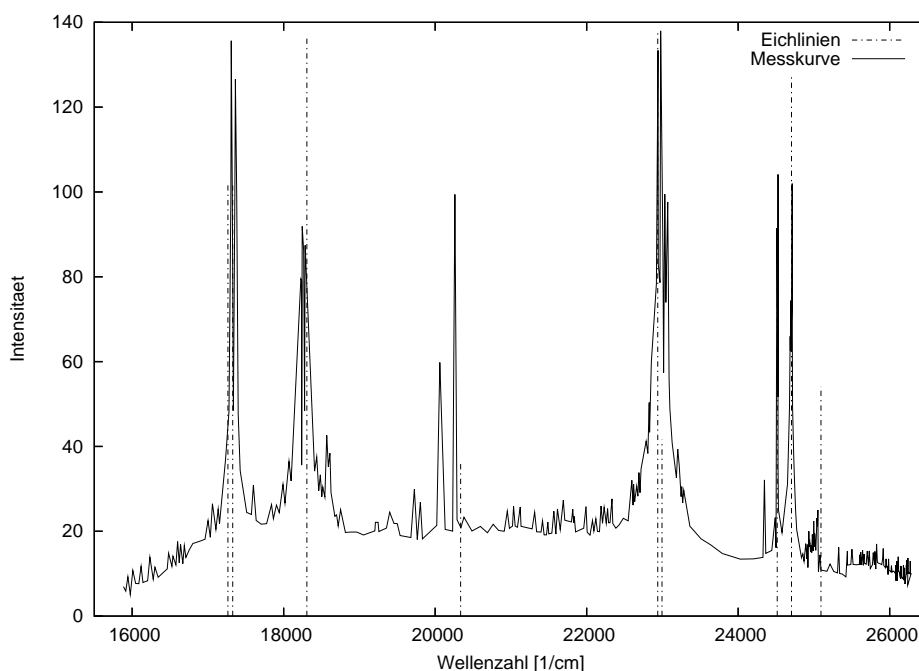


Abbildung 3: Mit photoelektrischer Messung aufgenommenes Spektrum von Hg. Die Eichlinien sind ebenfalls mit ihren bekannten Intensitäten aufgetragen.

Bei der photographischen Messung wird die Position auf dem Photo mit Hilfe der Linien der Hg- bzw He-Spektren, die auf den selben Film aufgenommen werden, geeicht. Dies führt auf eine Abhängigkeit der Wellenzahl von der Position² $k(x) = 25899 - 0.68x^2 - 40x$, die aus Schaubild 5 abgelesen werden kann.

3.2 CCl_4

Anhand der Eichkurve können nun die gemessenen Wellenzahlen ermittelt werden.

²in virtuellen Einheiten x

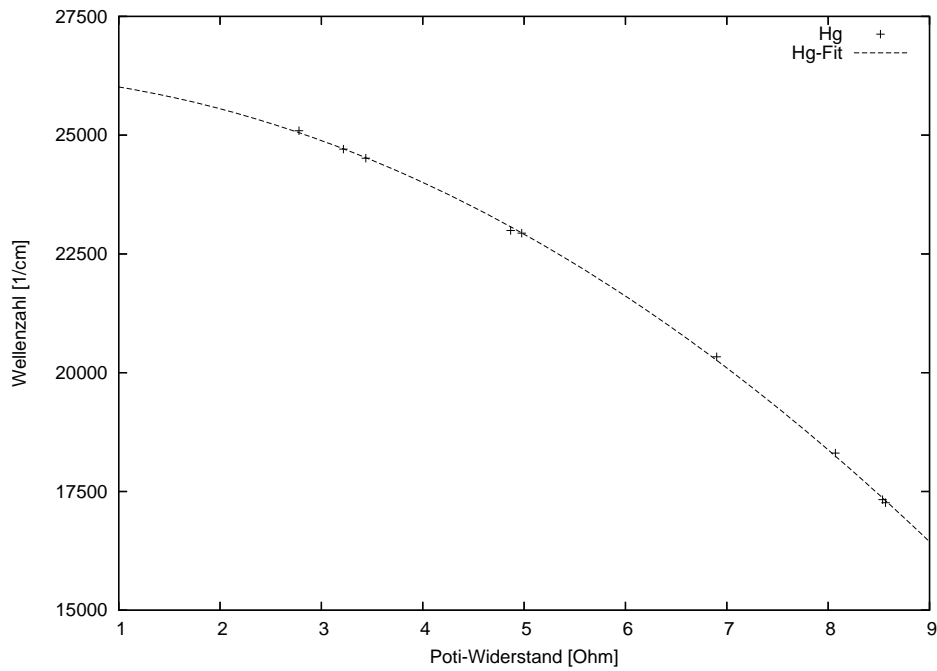


Abbildung 4: Eichkurve aus Hg-Messung für die photoelektrische Messung

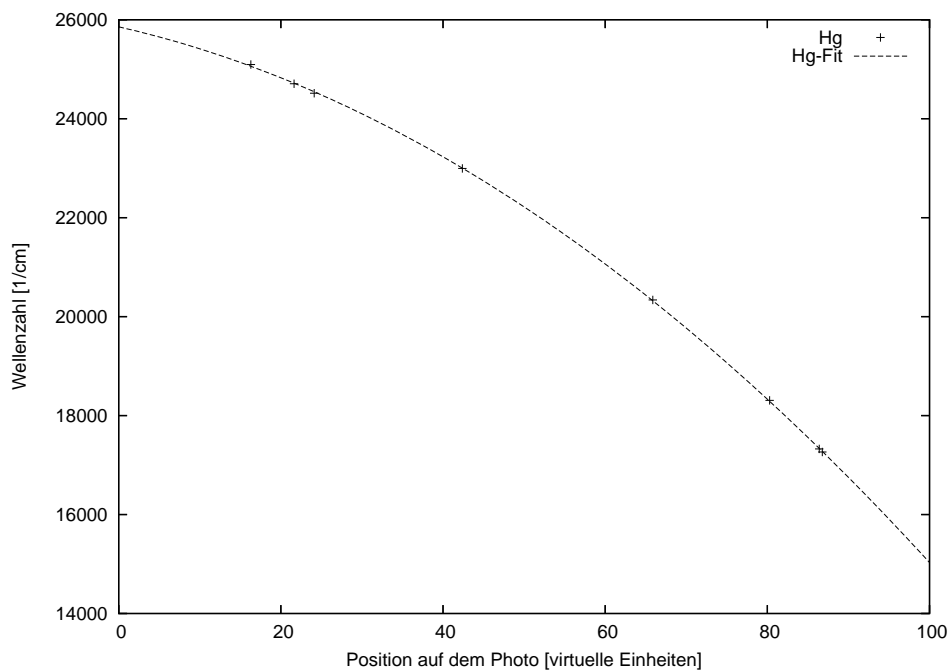


Abbildung 5: Die Eichkurve aus Hg-Messung für die photographische Messung gibt den Zusammenhang zwischen den virtuellen Einheiten auf dem Photo und der Wellenzahl wieder.

Leider ist schon das erste elektronisch aufgenommene Spektrum gegenüber der Eichung verschoben, der Peak der Raleigh-Streuung ist deutlich gegenüber dem erwarteten verschoben und muß

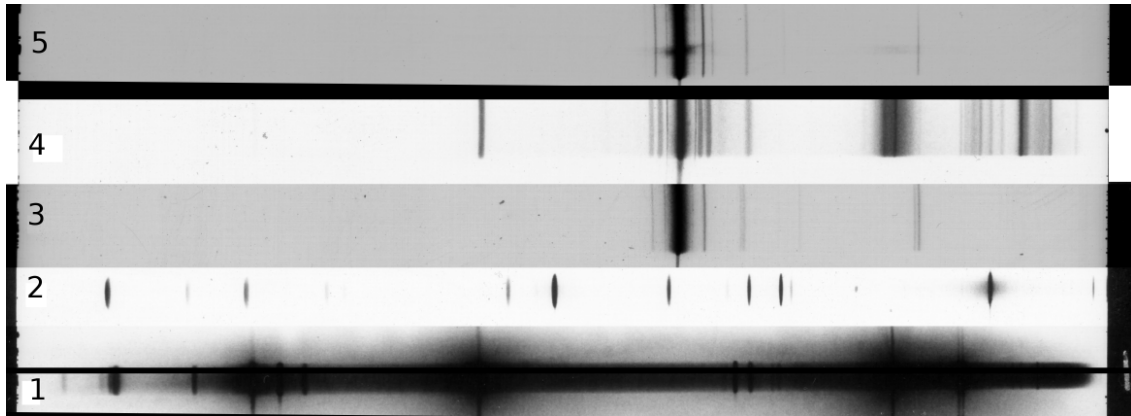


Abbildung 6: Spektren der von uns untersuchten Flüssigkeiten mit fotografischer Meßmethode. Die Wellenlänge des Lasers ist 476.5 nm: 1. Hg, 2. He, 3. CH_2Cl_2 , 4. CCl_4 , 5. $CHCl_3$

nachkorrigiert werden.

Da die Polarisierbarkeit von CCl_4 isotrop ist, werden keine Rotations-, sondern nur Vibrationslinien beobachtet. Aus der Charaktertafel der Punktgruppe T_d , der CCl_4 angehört, folgt, daß das Molekül zwar neun Normalschwingungen, aber nur vier verschiedene Eigenfrequenzen besitzt. Eine Normalschwingung ist zweifach und zwei sind dreifach entartet.

Wir konnten in unserer Messung nur drei der vier Linien sehen, die ν_1 -Linie war in unserem Spektrum nicht zu identifizieren. Allerdings gab es durchaus noch einige Peaks, die nicht zugeordnet werden konnten.

In den Tabellen stehen oben mit absteigender Wellenzahl die Stokeslinien und unten mit aufsteigender Wellenzahl die Anti-Stokes-Linien.

3.2.1 Photographische Messung bei 476 nm

Meßwert in cm^{-1}	Literaturwert Herzberg, cm^{-1}	Zuordnung nach Herzberg	Energie meV
787.9	790.5	$\nu_3(f_2), \nu_1 + \nu_4(F_2)$	97.9
309.9	314.0	$\nu_4(f_2)$	38.5
217.6	217.9	$\nu_2(e)$	27.1
170.1	145	$\nu_1 - \nu_4[F_2]$	21.1
155.3	145	$\nu_1 - \nu_4[F_2]$	19.3
230.5	217.9	$\nu_2(e)$	28.7
328.7	314.0	$\nu_4(f_2)$	40.9

3.2.2 Spektren aus der photoelektrischen Messung bei 488 nm

Meßwert in cm^{-1}	Literaturwert Herzberg	Zuordnung nach Herzberg	Energie meV
1530	1539	$2\nu_1 + 2\nu_4(A_1 + E + F_2)$	190.2
802	790.5	$\nu_3(f_2), \nu_1 + \nu_4(F_2)$	99.7
725	762		90.1
321	314.0	$\nu_4(f_2)$	39.9
226	217.9	$\nu_2(e)$	28.1
174	145	$\nu_1 - \nu_4[F_2]$	21.6
259	217.9 (?)	$\nu_2(e)$	32.2
353	314.0	$\nu_4(f_2)$	43.9

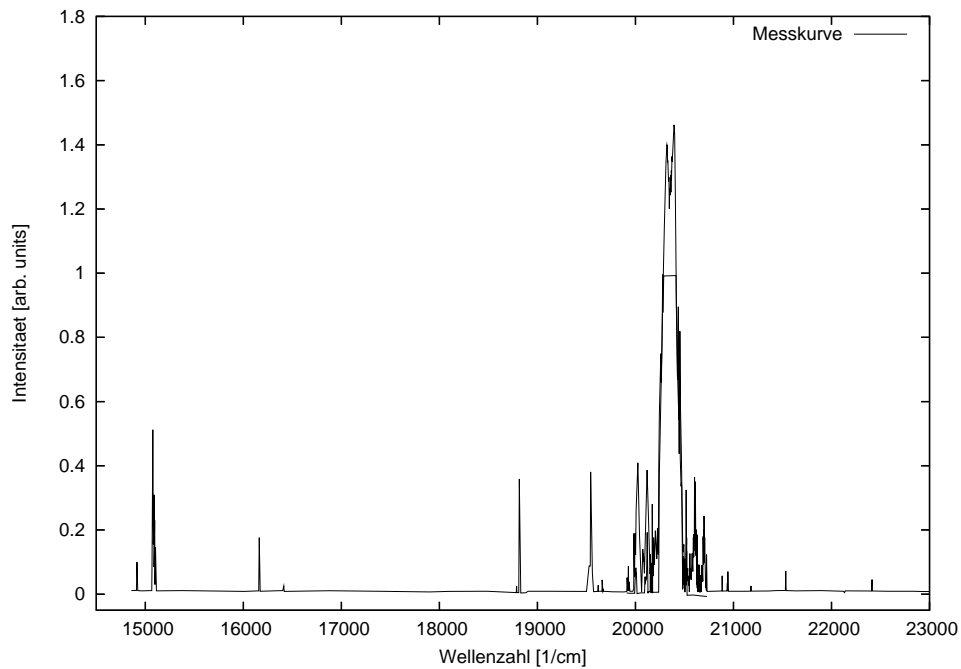


Abbildung 7: Photoelektrisches Spektrum von CCl_4

3.3 Chloroform - $CHCl_3$

Chloroform hat wie alle Moleküle aus der Punktgruppe C_{3v} 6 verschiedene Vibrations-Eigenfrequenzen, von denen wir ν_1 , ν_3 , ν_5 und ν_6 zuordnen konnten. Auch hier gibt es wiederum viele Linien die wir gar nicht oder nur sehr vage zuordnen konnten.

3.3.1 Photographische Messung bei 476 nm

Meßwert in cm^{-1}	Literaturwert Herzberg, cm^{-1}	Zuordnung nach Herzberg	Energie meV
3015.1	3018.9	$\nu_1^{CH}(a_1)$	374.8
778.8	761.2	$\nu_5^{CCl}(e)$	96.8
371.3	365.9	$\nu_3^{CCl_3}(a_1)$	46.2
267.7	262.0	$\nu_6^{CCl_3}(e)$	33.3
165.2			20.5
145.8			18.1
274.8	262.0.9	$\nu_6^{CCl_3}(e)$	34.2
373.0	365.9	$\nu_3^{CCl_3}(a_1)$	46.4

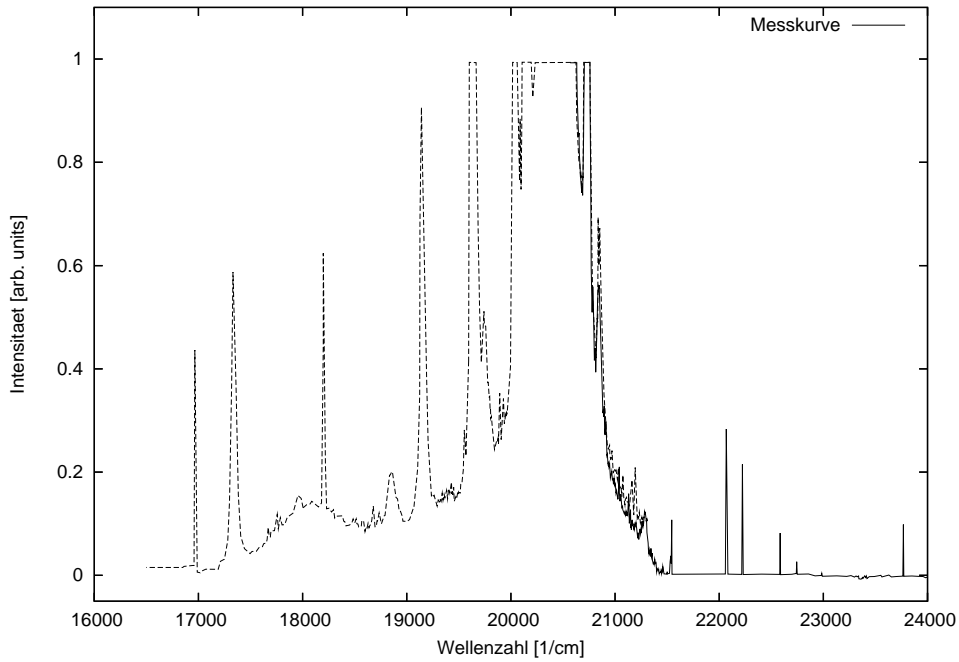


Abbildung 8: Photoelektrisches Spektrum von $CHCl_3$

3.3.2 Spektren aus der photoelektrischen Messung bei 488 nm

Meßwert in cm^{-1}	Literaturwert Herzberg, cm^{-1}	Zuordnung nach Herzberg	Energie meV
3036 ± 18	3018.9	$\nu^{CH}(a_1)$	377.5
1226 ± 15	1215.6	$\nu_4(e)$	152.3
735 ± 30	761.2	$\nu_5^{CCl}(e)$	91.4
624 ± 20	668.3	$\nu_2^{CCl}(a_1)$	77.5
330 ± 25	365.9	$\nu_3^{CCl_3}(a_1)$	41.0
360 ± 20	365.9	$\nu_3^{CCl_3}(a_1)$	44.8

3.4 CH_2Cl_2

CH_2Cl_2 hat 9 Vibrationseigenfrequenzen von denen wir 6 Stück beobachten und zuordnen konnten.

3.4.1 Photographische Messung bei 476 nm

Meßwert in cm^{-1}	Literaturwert Herzberg, cm^{-1}	Zuordnung nach Herzberg	Energie meV
3030	3045	$\nu_6^{CH}(b_1)$	376.7
2972	2985	$\nu_1^{CH}(a_1)$	369.5
1440	1417	$\nu_2^{CH_2}(a_1)$	179.0
753	736	$\nu_9^{CCl}(b_2)$	93.7
712	700	$\nu_3^{CCl}(a_1)$	88.5
284	283	$\nu_4^{CCl_2}(a_1)$	35.4
151			18.8
162			20.2
298	283	$\nu_4^{CCl_2}(a_1)$	37.1

3.4.2 Spektren aus der photoelektrischen Messung bei 472 nm.

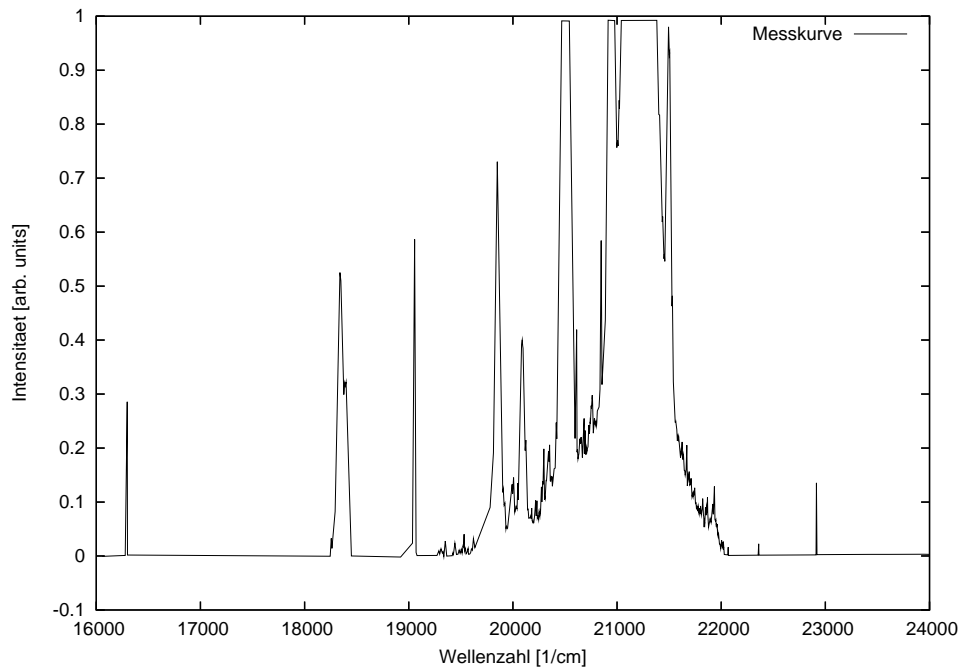


Abbildung 9: Photoelektrisches Spektrum von CH_2Cl_2

Meßwert in cm^{-1}	Literaturwert Herzberg, cm^{-1}	Zuordnung nach Herzberg	Energie meV
2872 ± 30	2822	$2\nu_2(A_1)$	357.0
1124 ± 20	1148	$\nu_5(a_2)?$ <i>Torsion?</i>	139.7
706 ± 30	700	$\nu_3^{CCl}(a_1)$	87.7
264 ± 20	283	$\nu_4^{CCl_2}(a_1)$	32.8
284 ± 30	283	$\nu_4^{CCl_2}(a_1)$	35.3
723 ± 6	736	$\nu_9^{CCl}(b_2)$	89.9
855 ± 3	898 (?)	$\nu_7(b_1)$ (<i>rocking</i>)	106.3
1149 ± 3	1148	$\nu_5(a_2)?$ (<i>Torsion?</i>)	142.9

4 Fazit mit Problembehandlung

4.1 Poti-Eichung

Nach einer Messung in der photoelektrischen Messung muß uns trotz Sorgfalt das Potentiometer angeschlagen sein und damit die Eichung bzw den Vergleich zwischen den Messungen nicht mehr richtig ermöglichte. Bei diesen Messungen kommen zum Teil die wichtigsten Raman-Linien der Stoffe nicht mehr vor, bzw ließen sich nicht mehr zuordnen.

4.2 Papier

Die Löcher im Rand des Papiers, die zu dessen Transport gedacht sind, rissen bei uns während des Versuchs immer wieder aus, weil sich die Papierrolle verklemmte. Dadurch blieb das Paier stehen

und es wurde zeitlich unterschiedliche Messungen auf die selbe Stelle gezeichnet, wodurch die Messungen unbrauchbar werden. Hier wäre es schön den Versuch mit einer etwas moderneren Methode durchzuführen³ um nicht den Ramaneffekt hinter den technischen Problemen zu vergessen.

4.3 Ausfall der Hochspannungsversorgung

Während des Versuchs fiel die Hochspannungsversorgung des Sekundärelektronenvervielfachers aus und wurde durch eine neue ersetzt. Allerdings haben wir bei der Fehlersuche den Laser runter- und wieder hochgedreht, wodurch er scheinbar in eine andere Mode einlockte. Außerdem führte dies zu verschiedenen Intensitäten.

Literatur

- [1] Gerhard Herzberg *Molecular spectra and molecular structure*, II., van Nostrand Reinhold Comp., 1945
- [2] Bergmann-Schaefer *Aufbau der Materie*, Experimentalphysik IV, Walter de Gruyter, NY 1975
- [3] Raman-Ordner *Ordner zum Versuch*
- [4] P. W. Atkins, *Physikalische Chemie*, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1988/1996
- [5] J. Brandmüller , H. Moser, *Einführung in die Ramanspektroskopie*

³2-Kanal-Meßkarte im PC