
Vibrations- und Rotationsniveaus zweiatomiger Moleküle

Nach der vereinfachten Theorie ist die Energie der Vibrationsniveaus gegeben durch

$$W_v(\nu) = \hbar\omega_0\left(\nu + \frac{1}{2}\right)$$

und die der Rotationsniveaus durch

$$W_r(J) = 2\pi\hbar B J(J+1)$$

Vibrationsübergänge

Energiedifferenz zweier benachbarter Vibrationsniveaus, ausgedrückt als äquivalente Frequenz und Vakuumwellenlänge:

Molekül	f in THz	λ in μm
O–O	47,4	6,33
N–N	70,8	4,24
N–O	57,1	5,25
Cl–O	25,6	11,71
C–O	65,1	4,61

Rotationsübergänge

Energie der Rotationsübergänge von $(J=1) \rightarrow (J=0)$ und $(J=2) \rightarrow (J=1)$, ausgedrückt als äquivalente Frequenz und Vakuumwellenlänge:

Übergang	$(J=1) \rightarrow (J=0)$		$(J=2) \rightarrow (J=1)$	
	f in GHz	λ in mm	f in GHz	λ in mm
Molekül				
O–O	86,8	3,46	173,5	1,73
N–N	119,9	2,50	239,8	1,25
N–O	100,3	2,99	200,6	1,49
Cl–O	37,4	8,02	74,8	4,01
C–O	115,9	2,59	231,8	1,29

Basisdaten

Die o. g. Daten wurden ebenso wie die folgenden Basisdaten aus [1] entnommen. Dabei sind m die reduzierte Masse und r der Gleichgewichtsabstand der Atome; α ist die »Federkonstante« der Bindung. Für c_0 wurde $3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$ benutzt.

Molekül	r in 10^{-8}m	α in Ncm^{-1}	m in a.m.u
O–O	1,208	11,8	8
N–N	1,0977	23,0	7,003
N–O	1,1508	16,0	7,468
Cl–O	1,570	4,74	11,02
C–O	1,1283	19,0	6,8606

Literatur

[1] Radzig, A.A. und Smirnov, B.M.: Reference Data on Atoms, Molecules and Ions. Springer, Berlin 1985.