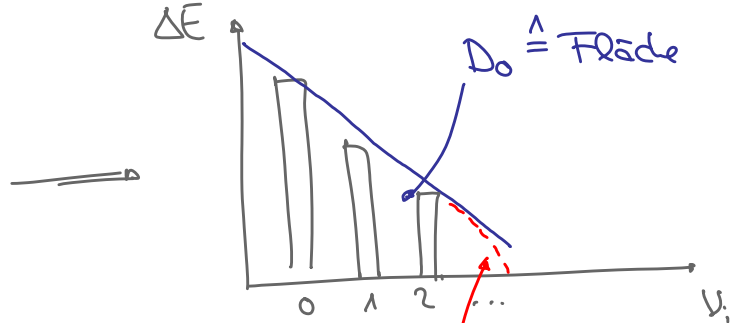
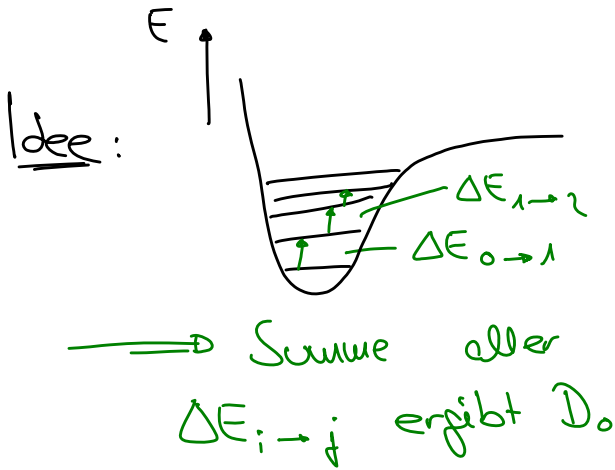


Ergänzung: Ridge-Spaner-Extrapolation



(Abweichung von Linearität bei höheren ν_i)

$$D_0 = \Delta E_{0 \rightarrow 1} + \Delta E_{1 \rightarrow 2} + \dots + \Delta E_{(\nu_{\max}-1) \rightarrow \nu_{\max}}$$

(mit $\frac{\Delta E(\nu \rightarrow \nu+1)}{hc} = \tilde{\nu}_e [1 - x_e(2(\nu+1))]$)

$\hookrightarrow \Delta E \sim \nu$ (linear)

\Rightarrow B.S. überschätzt D_0 !

Erweiterung der anharu. Oszillators:

$$E(\nu)/hc = (\nu + \frac{1}{2})\tilde{\nu}_e - (\nu + \frac{1}{2})^2 x_e \tilde{\nu}_e + (\nu + \frac{1}{2})^3 y_e \tilde{\nu}_e - \dots$$

$y_e, z_e \equiv$ höhere Anharmonizitätskonstanten

Bsp. $^1H^{35}Cl$: $\tilde{\nu}_e = 2990 \text{ cm}^{-1}$
 $x_e = 0.0176$, $y_e = 7.5 \cdot 10^{-5} \text{ etc.}$

bzw. $x_e \tilde{\nu}_e = 52.8 \text{ cm}^{-1}$, $y_e \tilde{\nu}_e = 0.224 \text{ cm}^{-1} \text{ etc.}$

ANM: D_0 kann auch direkt aus $x_e = \frac{tw_e}{4D_e}$ bestimmt werden