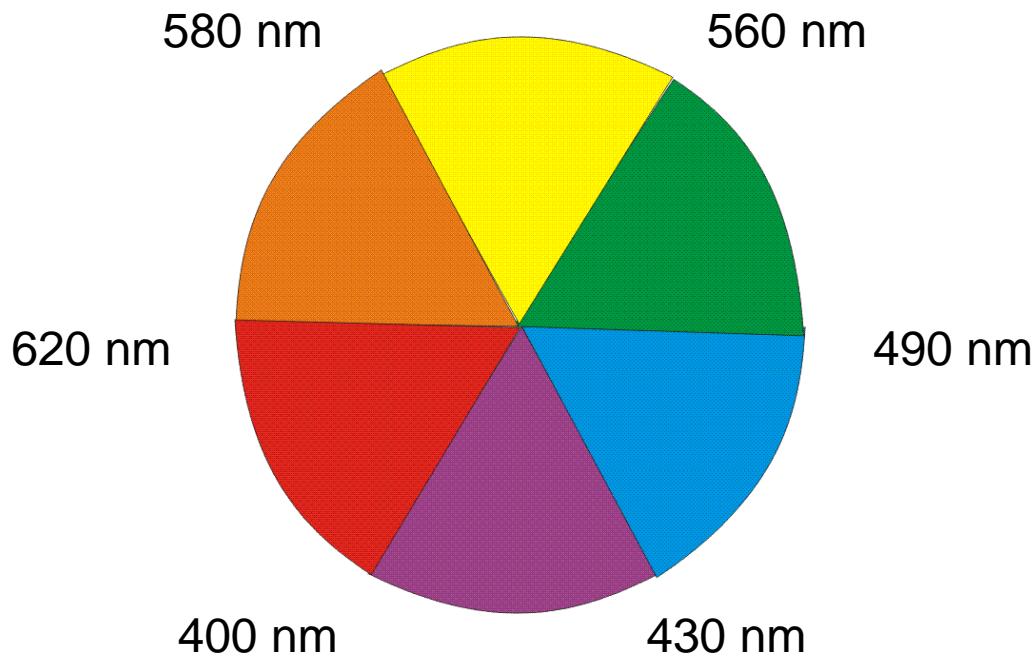


# Elektronski spektri

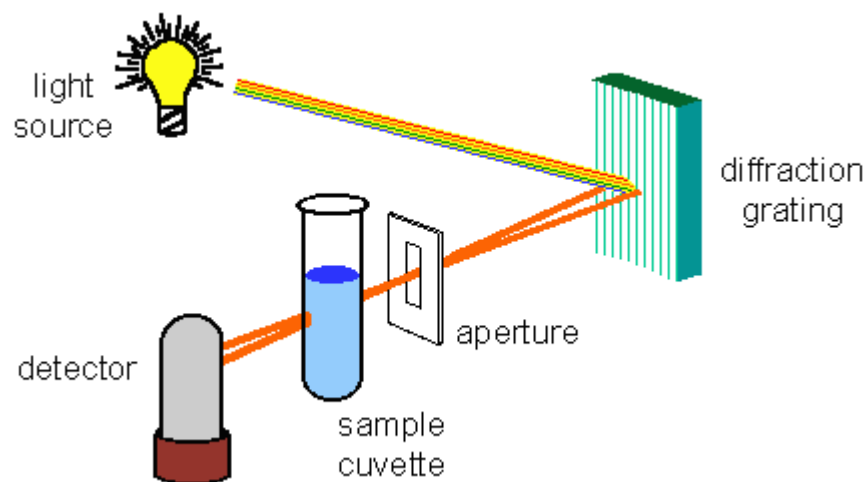
- interakcija molekula sa zračenjem  
u vidljivom i ultraljubičastom dijelu spektra



# Eksperimentalne tehnike

## UV-VIS SPEKTROFOTOMETRIJA

- izvori zračenja
- optički put, kivete
- prizme, rešetke
- detektori



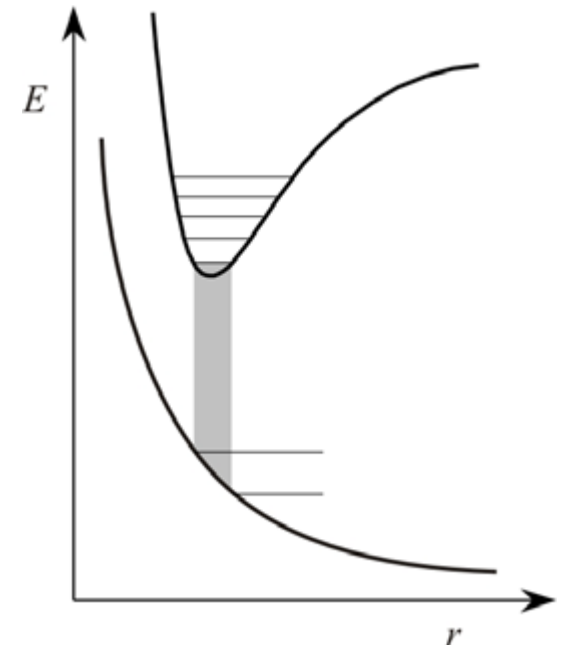
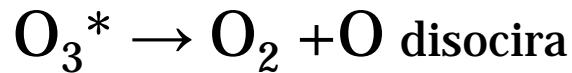
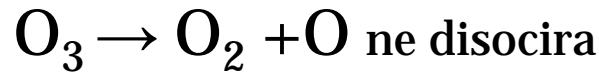
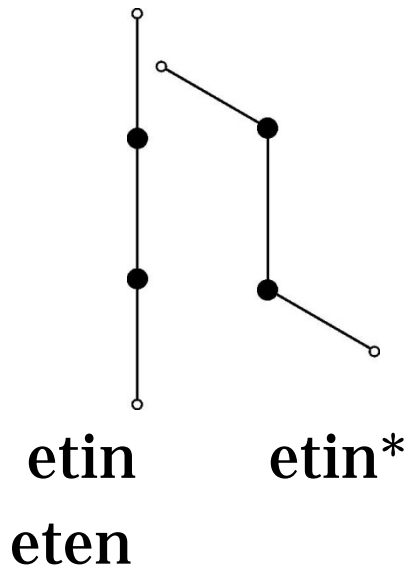
# Pobuđena stanja

-svojstva molekula u pobuđenim stanjima razlikuju se od svojstva molekula u osnovnom elektronskom stanju

-ravnotežna geometrija

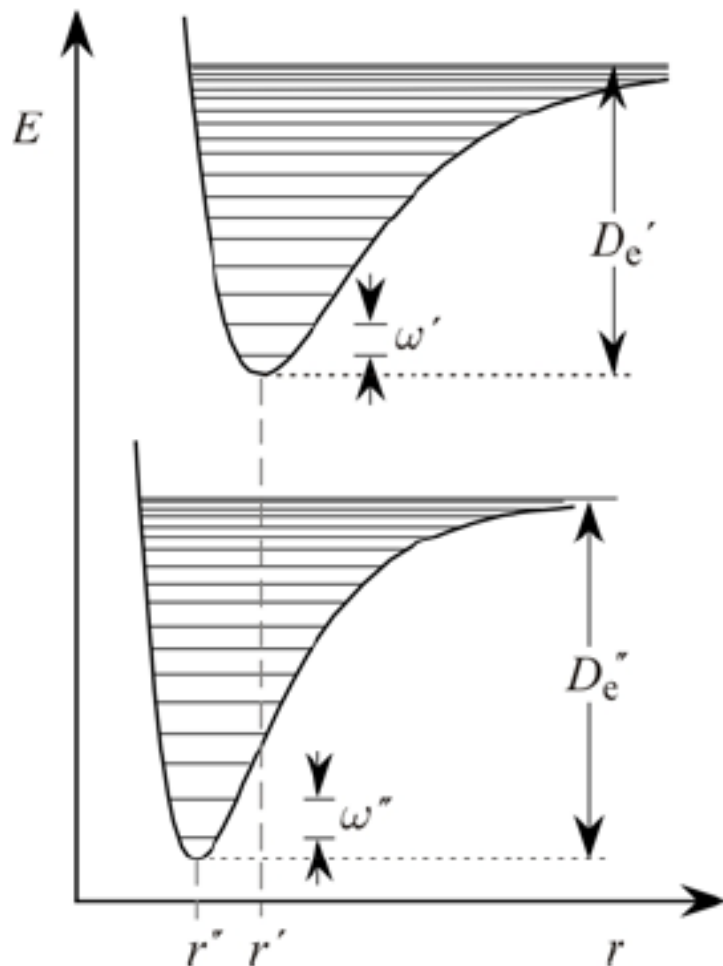
-stabilnost

-reaktivost



Krivulje elektronske energije za stabilno pobuđeno i nestabilno osnovno stanje

# Usporedba krivulja elektronskih energija za dva elektronska stanja



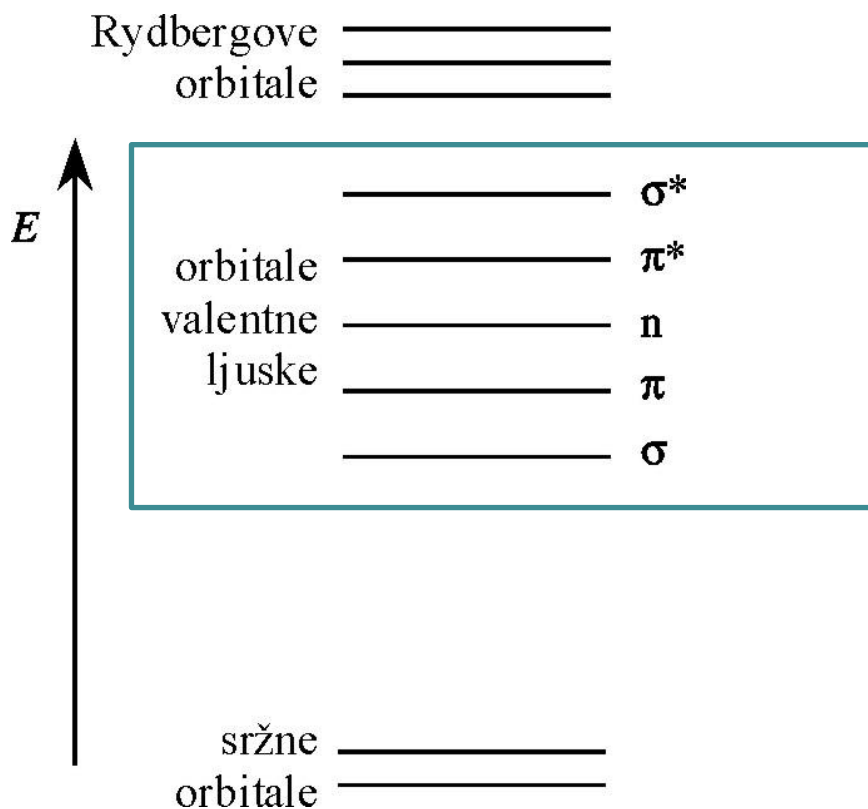
$$r_e' > r_e''$$

$$D_e' < D_e''$$

$$\omega_e' < \omega_e''$$

Krivulje elektronske energije za dva elektronska stanja

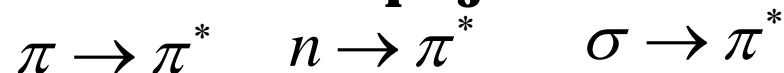
# Vrste orbitala u molekuli



⇒ **Rydbergovi prijelazi**

$$\tilde{\nu} = \frac{E_i}{hc} - \frac{R}{(n - \delta)^2}$$

⇒ **Elektronski prijelazi**

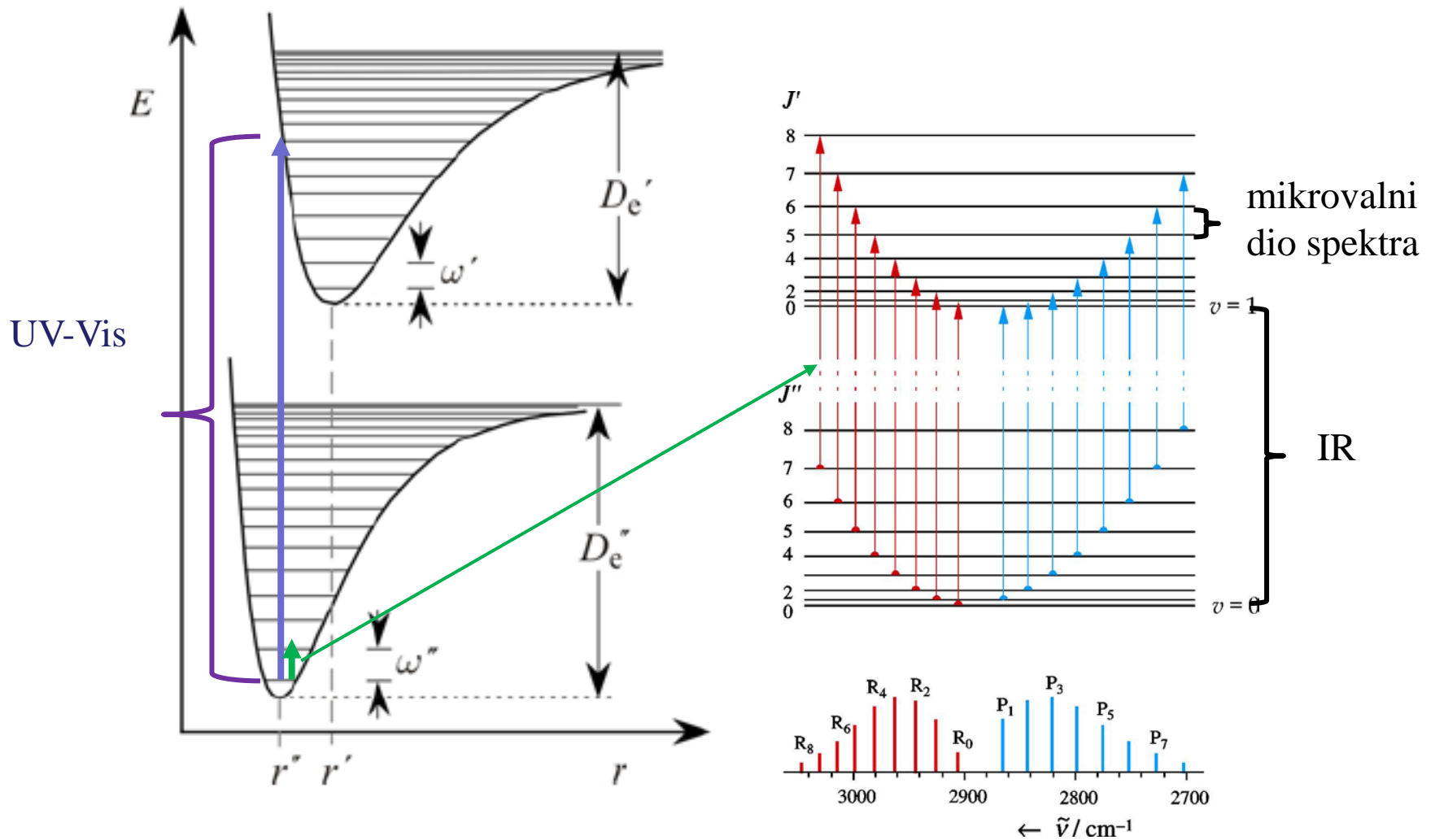


singlet → triplet

singlet → singlet

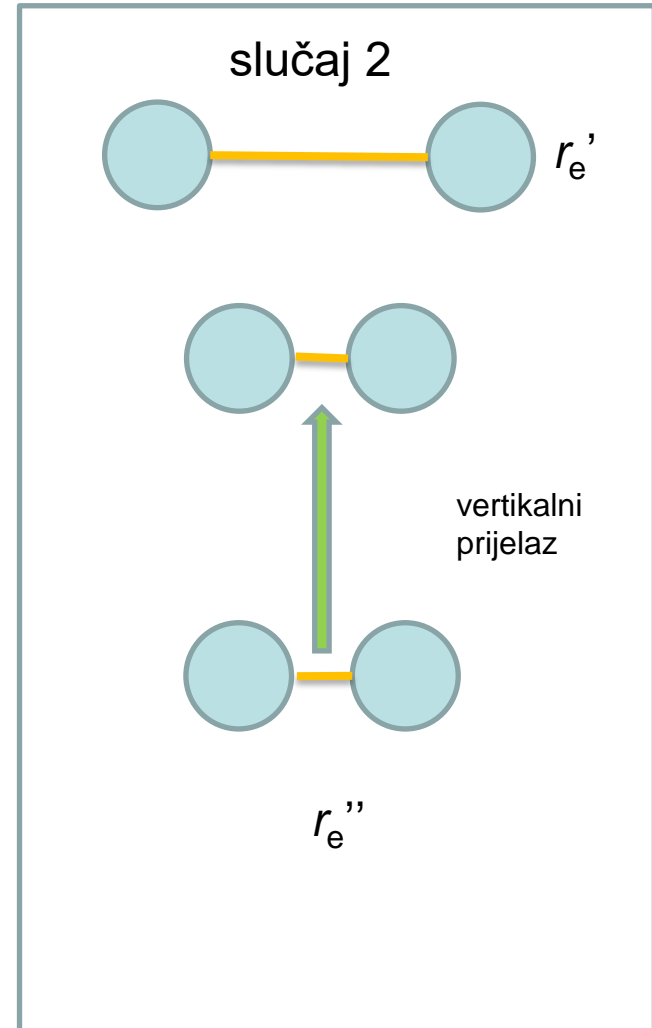
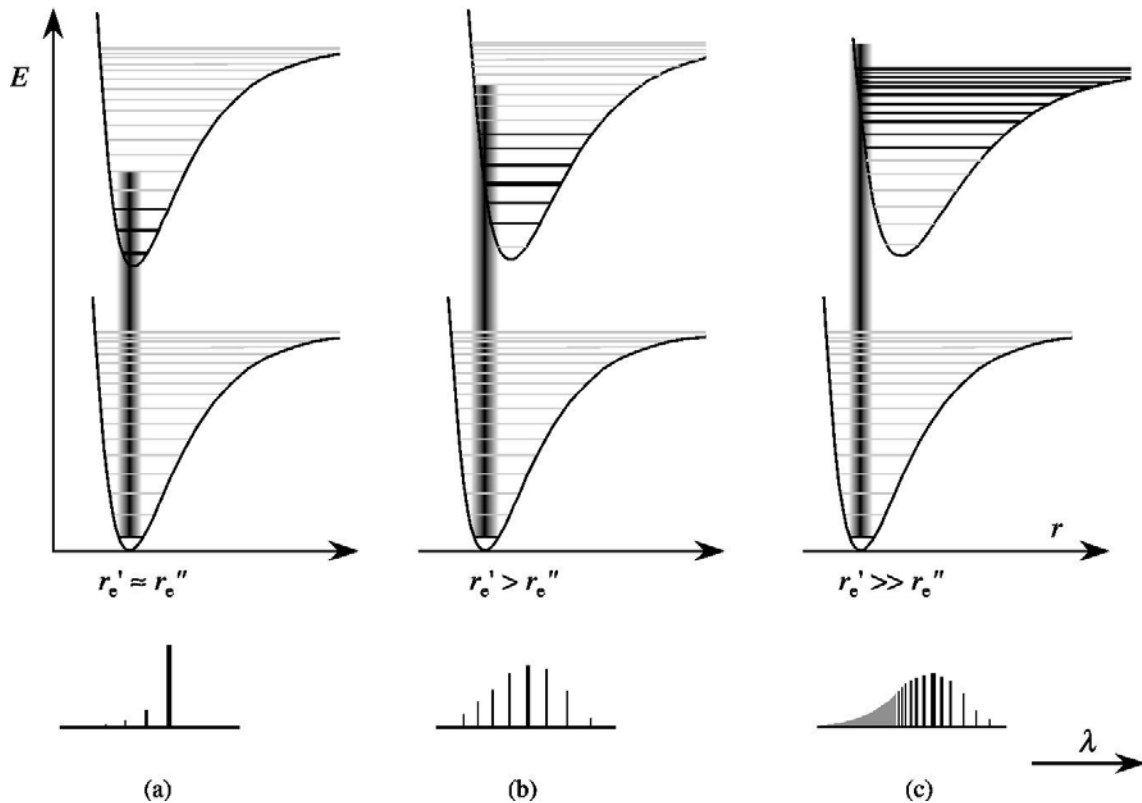
⇒ **slične atomskim orbitalama**

$$\tilde{\nu} = [T'(v') + G'(v') + F'(J')] - [T''(v'') + G''(v'') + F''(J'')]$$



# Franck & Condonovo načelo

- raspodjela intenziteta
- vertikalni prijelaz je najvjerojatniji



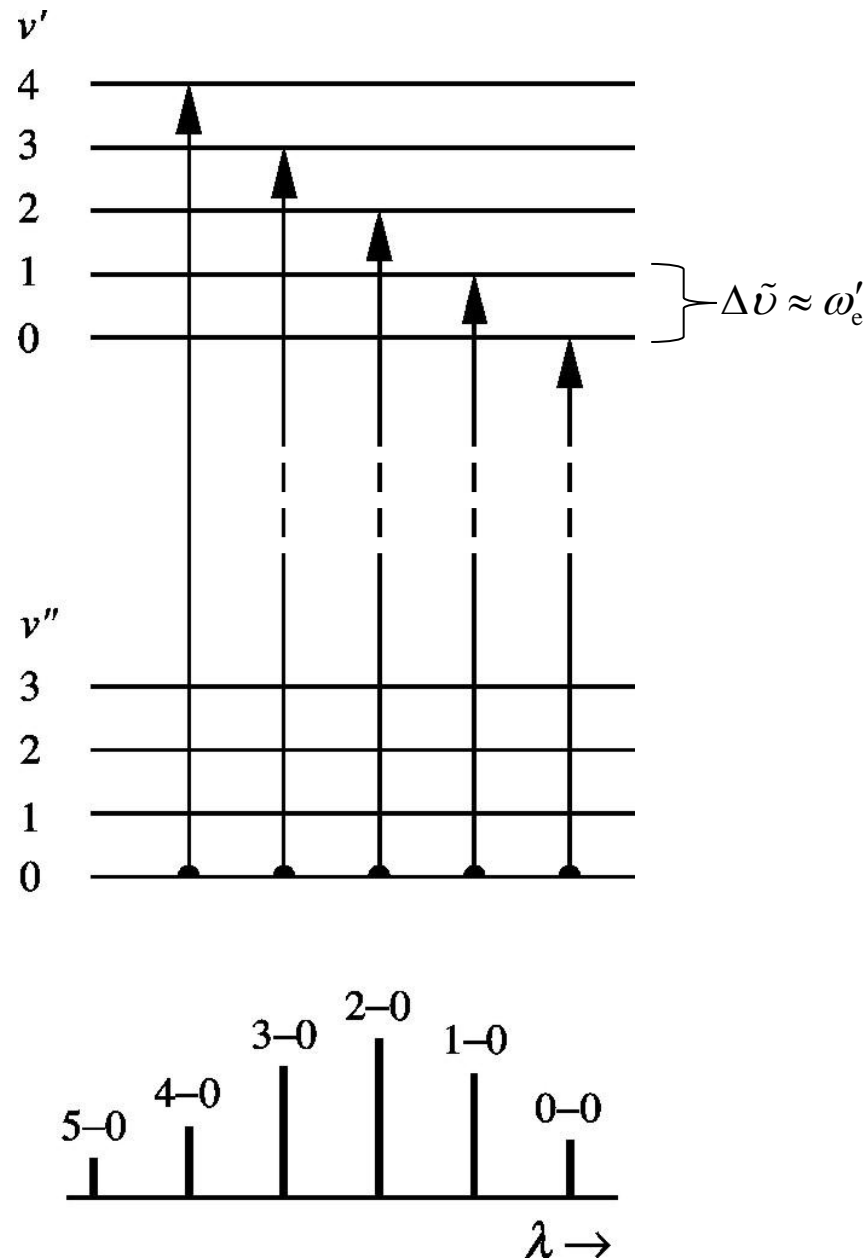
# ELEKTRONSKI PRIJELAZI

## VRPCE PROGRESIJE

Vibronske vrpce koje nastaju prijelazima iz zajedničke početne razine na sve više razine drugog elektronskog stanja.

$$\Delta \tilde{\nu} \approx \omega'_e$$

$$\Rightarrow \omega'_e x'_e \quad D'_e$$





# VRPCE SEKVENCIJE

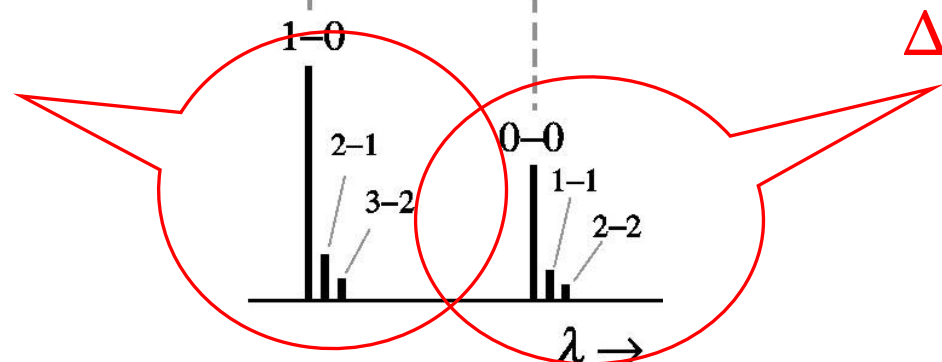
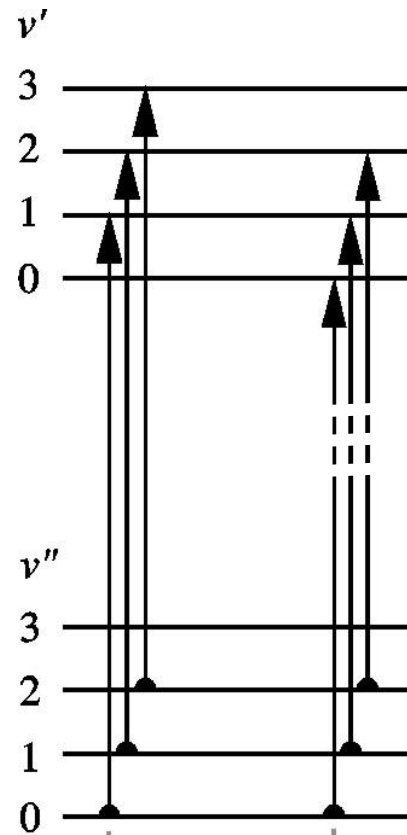
Vibronske vrpce koje  
imaju zajedničku razliku  
vibracijskih kvantnih  
brojeva  $\Delta v$ .

$$\Delta \tilde{\nu} \approx \omega'_e - \omega''_e$$

- vrpce sekvence bliže su u spektru

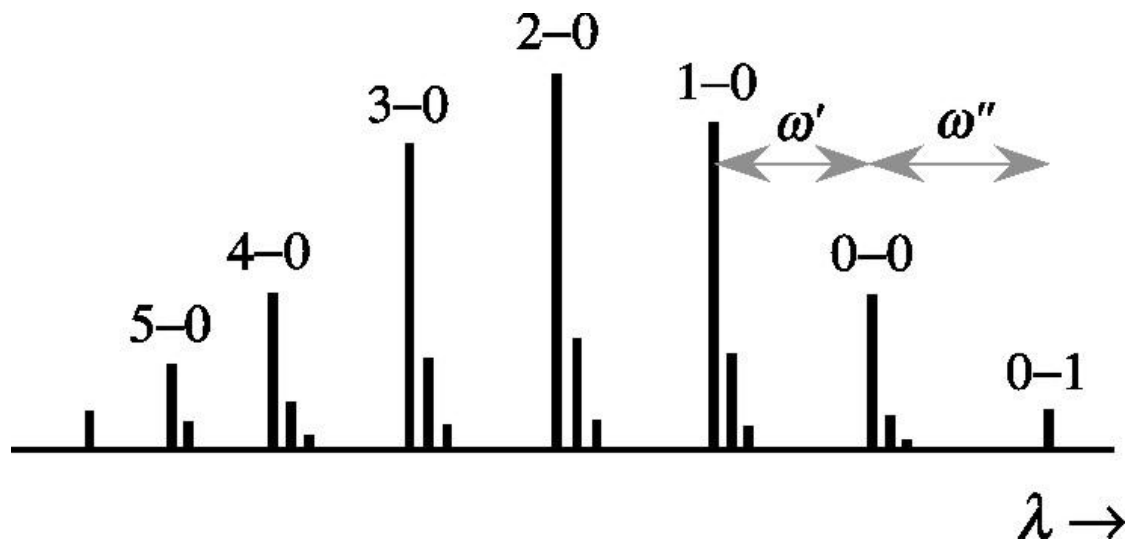
$\Delta v = 1$

$\Delta v = 0$



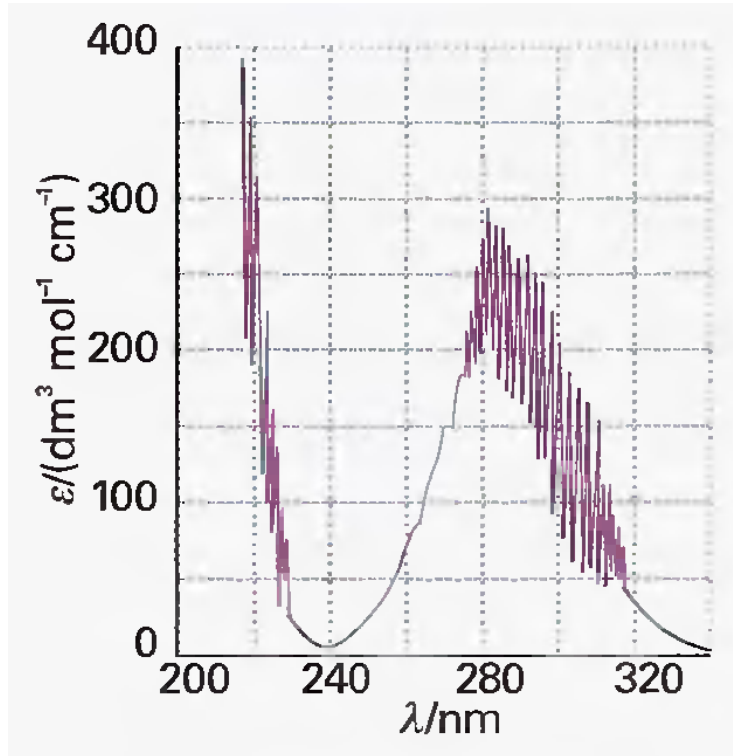
# Elektronski sustav

Prijelaz iz jednog u drugo elektronsko stanje uzrokuje niz vibronskih vrpca koje zajedno čine **elektronski sustav**.

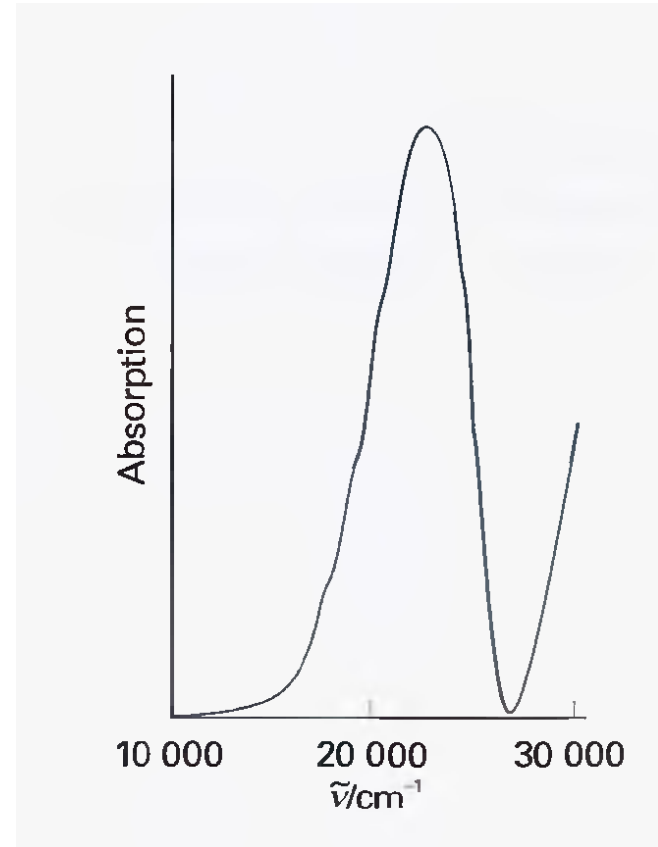


# Vibracijska struktura elektronskih vrpci

- vibronski prijelazi
- rovibronske linije
- elektronski sustavi

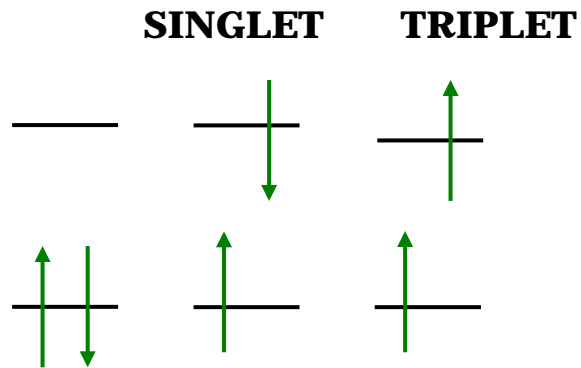


SO<sub>2</sub>(g) pri 298 K



[Ti(OH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>]<sup>3+</sup> (aq) pri 298 K

# Promjene multipliciteta i luminiscencija



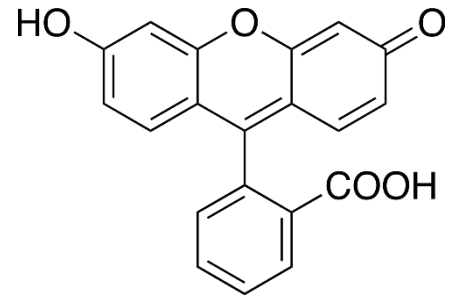
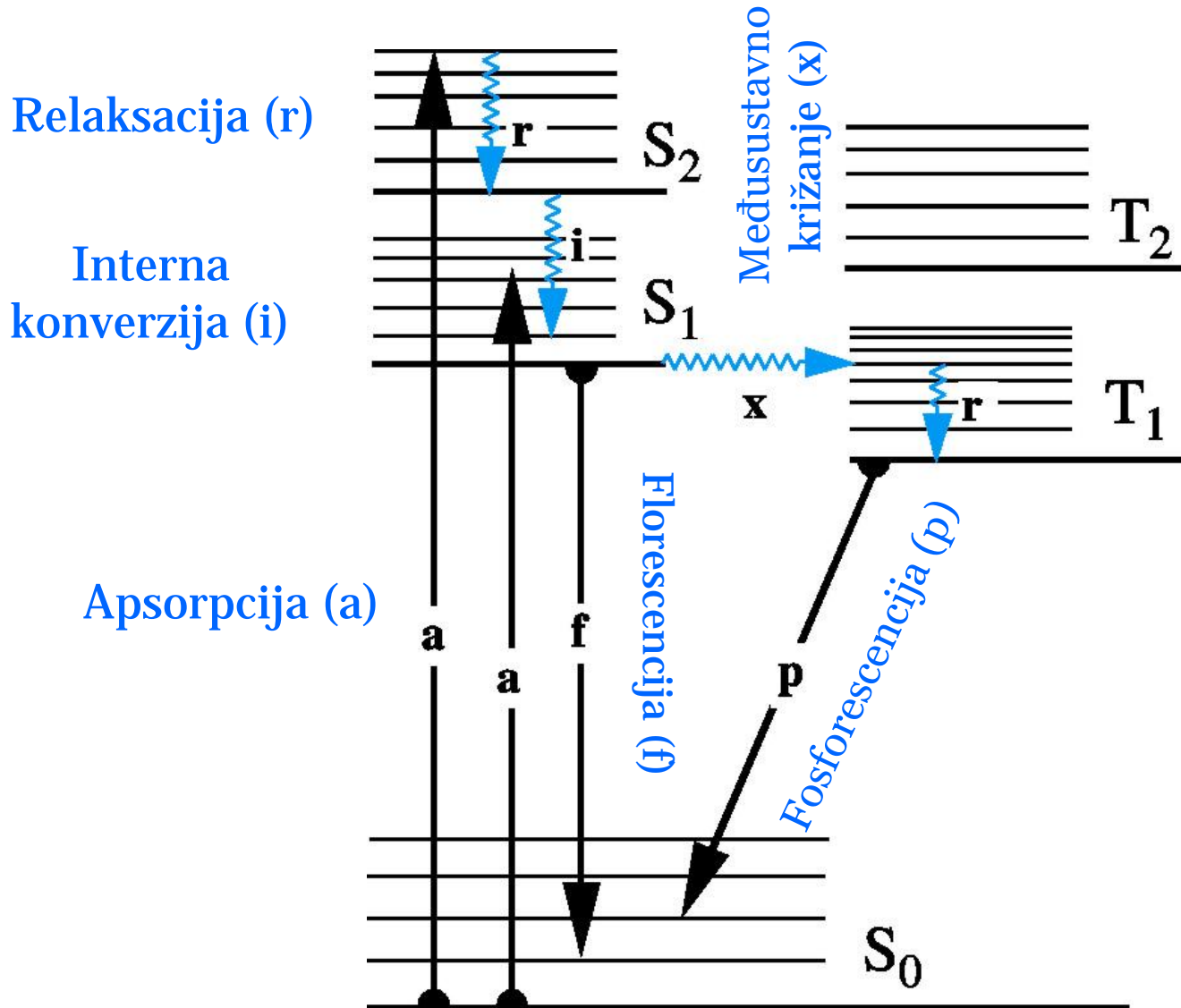
Osnovno  
stanje

Pobuđena  
stanja

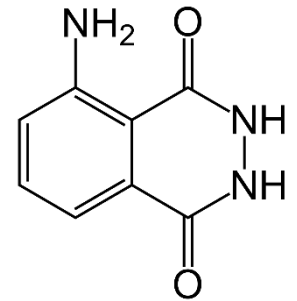
$$E(\text{triplet}) < E(\text{singlet})$$



# Diagram Jablonskog



fluorescein



luminol

# Pitanja za ponavljanje

## ELEKTRONSKI PRIJELAZI

- U kojem se području spektra očituju elektronski prijelazi?
- Nabrojite tipove orbitala kod molekula prema energijama.
- Kakva su svojstva molekula u pobuđenim elektronskim stanjima?
- Što je elektronski sustav?
- Što su vibronske vrpce u spektru?
- Što su vrpce progresije?
- Što su vrpce sekvencije?
- Kako glasi Franck-Condonov princip?
- Što je vertikalni prijelaz?
- Što se može zaključiti ako je u elektronskom sustavu 0-0 vrpca najintenzivnija?
- Objasnite razliku između fluorescencije i fosforescencije.
- Koji je proces obično brži?
- Što je dijagram Jablonskog?
- Koje informacije se mogu dobiti analizom elektronskih spektara?