

X. vježba

MOLEKULARNA SPEKTROSKOPIJA

Elektronski i vibracijski prijelazi molekule I₂ u plinskoj fazi

SVRHA RADA

Snimanje apsorpcijskog spektra plinovitog molekularnog joda u vidljivom području elektromagnetskog zračenja pomoću spektrofotometra i određivanje položaja linija vibracijskih prijelaza kombiniranih s elektronskim prijelazom iz osnovnog stanja X ($^1\Sigma_g^+$) u pobuđeno tripletno elektronsko stanje b ($^3\Pi_{0u}^+$). Provjera valjanosti aproksimacije anharmoničkog potencijala u opisu kovalentne interakcije dvaju atoma joda u pobuđenom elektronskom stanju b pomoću energija vibracijskih razina tog elektronskog stanja. Provedba kvantno-kemijskih proračuna za opis plohe potencijalne energije molekule joda u osnovnom elektronskom stanju X pri različitim, fiksiranim internuklearnim udaljenostima. Analiza i provedba nelinearne regresije nad izračunanim podacima za opis parametara Morseova potencijala te usporedba s literaturnim vrijednostima.

ZADATAK

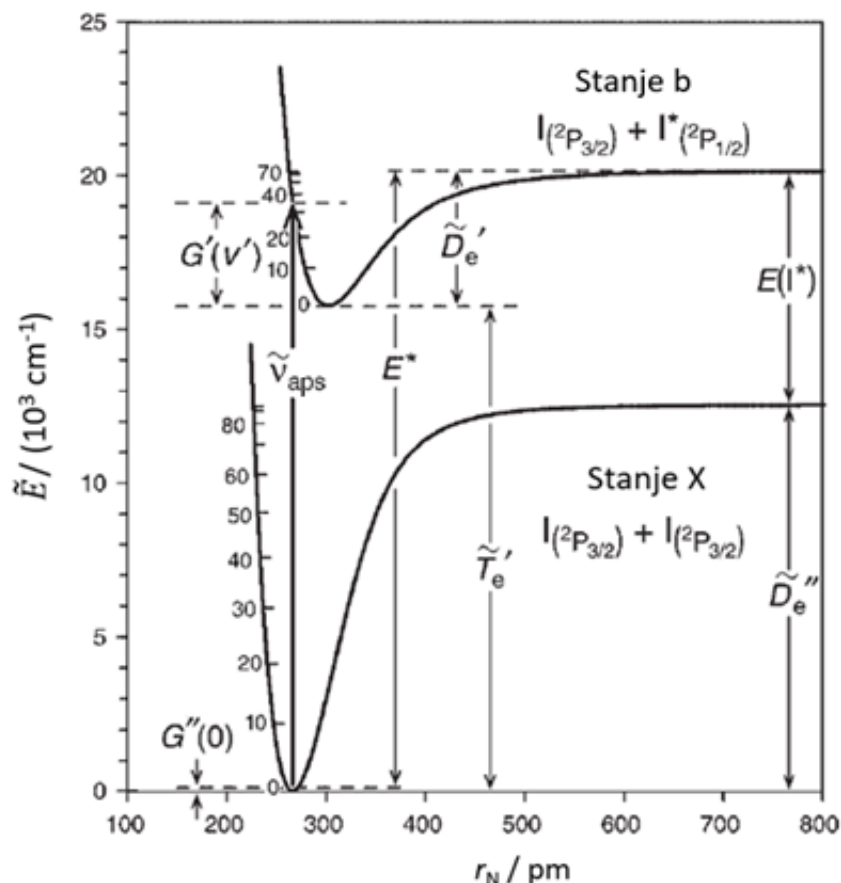
1. Odrediti energiju pobuđenog elektronskog stanja b molekule joda u odnosu na osnovno stanje X. Odrediti parametre modela anharmoničkog oscilatora za pobuđeno elektronsko stanje b i energiju disocijacije iz tog pobuđenog stanja.
2. Provesti kvantno-kemijski proračun ovisnosti energije molekule joda u osnovnom elektronskom stanju X o internuklearnoj udaljenosti. Odrediti parametre Morseova potencijala i preračunati ih u parametre anharmoničkog oscilatora. Odrediti energiju disocijacije molekularnog joda u plinskoj fazi iz osnovnog elektronskog stanja.

UVOD

Cilj ovog istraživanja je spektroskopski okarakterizirati molekulu joda u osnovnom elektronskom stanju X, te u jednom od dostupnih, pobuđenih tripletnih elektronskih stanja b. Za molekulu joda se uz oznaku elektronskog stanja dodjeljuju, prema simetrijskim svojstvima valnih funkcija unutar točkine grupe D_{∞h}, simboli prema kojima se očituje spinski multiplicitet, ukupna orbitna kutna količina gibanja elektrona i simetrija s obzirom na primjenu

odgovarajućih operatora zrcaljenja. Na taj način se za osnovno, singletno elektronsko stanje molekule joda dodjeljuje simbol $^1\Sigma_g^+$, a za promatrano pobuđeno tripletno elektronsko stanje simbol $^3\Pi_{0u}^+$. Molekula joda sadrži ukupno 23 elektronska stanja, a predmet promatranja u ovoj vježbi su navedena elektronska stanja X i b, budući da prijelaz između ta dva elektronska stanja molekule joda nastaje uslijed apsorpcije elektromagnetskog zračenja u vidljivom dijelu spektra (*slika 1*). Svaka molekula ima različita svojstva u različitim elektronskim stanjima zbog razlike u elektronskim konfiguracijama tih stanja. Razlog tomu je što promjena u elektronskoj konfiguraciji uzrokuje i promjene u vibracijskoj te rotacijskoj strukturi promatranog sustava. Samim time, za potpunu karakterizaciju svojstva molekule joda pri dva navedena elektronska stanja potrebno je opisati pripadajuća vibracijska i, ukoliko je moguće, rotacijska stanja te odrediti razliku u energiji između minimuma navedenih dvaju elektronskih stanja. Potpunu karakterizaciju vibracijskih i rotacijskih stanja promatranih veznih elektronskih stanja molekule joda moguće je provesti eksperimentalnim, spektroskopskim tehnikama te računalnim pristupom putem kvantno-kemijskih proračuna.

Za spektroskopsku karakterizaciju pobuđenog tripletnog elektronskog stanja b koristi se UV/VIS apsorpcijska spektroskopija. U toj se metodi termostatirani uzorak plinovitog joda pobuđuje elektromagnetskim zračenjem nizom valnih duljina u vidljivom dijelu spektra te pritom se mjeri absorbancija uzorka. Ukoliko energija upadnog zračenja odgovara nekom energijskom prijelazu, tada će upadno zračenje biti apsorbirano uslijed čega dolazi do pobude molekule iz osnovnog elektronskog i vibracijskog stanja u dostupna vibracijska stanja pobuđenog elektronskog stanja (*slika 1*). U slučaju da je energija apsorbiranog zračenja veća od razlike energija osnovnog i pobuđenog elektronskog stanja, dolazi do pobude u viša vibracijska i rotacijska stanja pobuđenog elektronskog stanja. Valne duljine pripadajuće energije zračenja, koje odgovaraju razlici energija pobuđenog i osnovnog stanja molekule, mogu se iščitati iz apsorpcijskog spektra molekularnog joda u plinskoj fazi. Ti prijelazi su kombinacija termova pobuđenog elektronskog stanja, odnosno njemu pripadnih vibracijskih i rotacijskih stanja, te vibracijskih i rotacijskih termova osnovnog elektronskog stanja molekule. U spektroskopiji se takvi prijelazi, koji uzrokuju promjenu elektronske i vibracijske energije promatranog sustava, zovu *vibronski prijelazi*. U spektru su vibronski prijelazi popraćeni i promjenama rotacijskih stanja, gdje se stoga apsorpcijska vrpca sastoji od niza linija uzrokovanih promjenama rotacijske energije, te takve linije zovemo *rovibronskim linijama*.¹



Slika 1. Prikaz plohe potencijalne energije molekule joda u osnovnom elektronskom stanju X ($^1\Sigma_g^+$) i pobuđenom tripletnom stanju b ($^3\Pi_{0u}^+$) u ovisnosti o internuklearnoj udaljenosti, r_N . Na ordinati su naznačene vrijednosti termova koje zajedno s vrijednostima vibracijskog kvantnog broja na krivuljama ploha opisuju energiju pripadnih vibracijskih stanja u mjernoj jedinici valnog broja. Dodatno, \tilde{T}_e' označava energiju elektronskog prijelaza iz stanja X u stanje b, $G''(0)$ predstavlja energiju osnovnog vibracijskog stanja osnovnog elektronskog stanja, \tilde{D}_e'' predstavlja klasičnu energiju disocijacije molekule joda iz stanja X, a \tilde{D}_e' predstavlja klasičnu energiju disocijacije molekule joda iz stanja b. Oznakom \sim iznad simbola navedenih veličina naznačuje se da su te energije iskazane u mjernoj jedinici valnog broja. Također, $E(I^*)$ predstavlja energiju pobuđenja atoma joda za prijelaz $^2P_{1/2} \leftarrow ^2P_{3/2}$.ⁱⁱ

Vibronske vrpce koje nastaju prijelazima iz zajedničkog početnog vibracijskog stanja redom na sva viša vibracijska stanja drugog elektronskog stanja čine tzv. *progresiju*. Razmak među vrpcama progresije tako vjerno preslikava strukturu vibracijskih razina u pobuđenom elektronskom stanju. Očekivani apsorpcijski spektar joda u plinovitoj fazi sadrži nekoliko superponiranih krivulja progresija, glavnu iz osnovnog elektronskog i vibracijskog stanja te par progresija vrućih vrpce iz pobuđenih vibracijskih stanja osnovnog elektronskog stanja. Svaki maksimum u spektru predstavlja prijelaz iz osnovnog elektronskog i određenog vibracijskog stanja u pobuđeno elektronsko stanje te njemu karakteristična vibracijska stanja.

Iz dobivenog spektra moguće je odrediti sve parametre molekule joda u pobuđenom tripletnom elektronskom stanju b, osim ravnotežne udaljenosti atoma r_e' . Za određivanje ravnotežne udaljenosti potrebno je dodatno provesti analizu rotacijskog spektra ili ju procijeniti kvantno-kemijskim proračunom.

Za svako elektronsko stanje ovisnost energije molekularnog sustava o geometriji istog opisuje ploha potencijalne energije (engl. *Potential Energy Surface*, PES), što je jedan od najvažnijih koncepata u teorijskoj kemiji. Elektronska stanja čiji PES posjeduje barem jedan strogi lokalni minimum u prostoru geometrije molekule zovemo veznim elektronskim stanjima koja posljedično sadrže vibracijsku i rotacijsku strukturu. Ukoliko PES za pobuđeno elektronsko stanje ne sadrži strogi lokalni minimum, takva stanja nazivamo protuveznim elektronskim stanjima i ona ne sadrže vibracijska niti rotacijska stanja. S obzirom na to da je apsorpcijski spektar posljedica prijelaza između dva vezna elektronska stanja, njihovi PES-ovi sadrže strogi lokalni minimum i pripadajuća vibracijska i rotacijska stanja. Shematski prikaz PES-a za osnovno i tripletno pobuđeno elektronsko stanje molekule joda nalazi se na slici 1. U ovoj vježbi se za opis vibracijskih stanja koristi model anharmoničkog oscilatora prema Morseovom potencijalu čiji eksplicitni oblik je dan izrazom

$$\tilde{E}(r) = \tilde{D}_e(1 - e^{-a(r-r_e)})^2 \quad (1)$$

gdje je \tilde{E} energija u mjernoj jedinici valnog broja, \tilde{D}_e predstavlja klasičnu energiju disocijacije molekule u jedinici valnog broja, a je parametar za opis potencijala, a r_e je ravnotežna udaljenost između atoma joda. Analizom PES-a molekule joda za oba promatrana elektronska stanja mogu se nelinearnom regresijom uz funkcionalni oblik iz relacije (1) odrediti parametri Morseova potencijala, \tilde{D}_e , a i r_e .

Korištenjem Morseova potencijala iz relacije (1) u Schrödingerovoj vremenski neovisnoj jednadžbi, dobiveni izraz opisa vibracijskih termova poprima eksplicitni oblik

$$G(v) = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots \quad v \in \mathbb{N}_0 \quad (2)$$

pri čemu se uglavnom uzima razvoj do kvadratnog člana. U gornjoj relaciji (2) simbol G predstavlja energiju vibracijskog terma u mjernoj jedinici valnog broja, ω_e je klasični valni broj, član $\omega_e x_e$ naziva se anharmoničnost, a v je vibracijski kvantni broj. Određivanjem klasičnog valnog broja i člana anharmoničnosti definirani su iznosi energija pojedinih

vibracijskih stanja, a daljnjom analizom progresije energija moguće je odrediti maksimalan iznos vibracijskog kvantnog broja prije disocijacije molekule.

Energija apsorbiranog fotona može se rastaviti na doprinose koji su opisani u sljedećoj relaciji

$$\tilde{\nu}_{\text{aps}} = \tilde{T}'_e - G''(0) + G'(v') \quad (3)$$

gdje \tilde{T}'_e predstavlja energiju elektronskog prijelaza ($X \rightarrow b$), $G''(0)$ je energija osnovnog vibracijskog stanja osnovnog elektronskog stanja i $G'(v')$ je energija vibracijskog stanja pobuđenog elektronskog stanja te su sve opisane veličine iskazane u mjernoj jedinici valnog broja. Drugim riječima, razlika energijski višeg i nižeg stanja odgovara razlici energija između dva minimuma na pripadajućim plohama, \tilde{T}'_e , umanjenoj za energiju osnovnog vibracijskog stanja u osnovnom stanju X, $G''(0)$, te uvećana za energiju vibracijskog stanja u elektronskom stanju b, $G'(v')$. Uvođenjem jednadžbe (2) u relaciju (3), odnosno uvođenjem opisa vibracijskih termova za pobuđeno elektronsko stanje molekule joda dobiva se sljedeći izraz

$$\tilde{\nu}_{\text{aps}} = \tilde{T}'_e - G''(0) + \omega_e' \left(v' + \frac{1}{2} \right) - \omega_e' x_e' \left(v' + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (4)$$

pri čemu su ω_e' i $\omega_e' x_e'$ klasični valni broj te anharmoničnost molekule joda u pobuđenom tripletnom elektronskom stanju b. Za karakterizaciju vibracijskih stanja pobuđenog elektronskog stanja molekule joda potrebno je odrediti iznose klasičnog valnog broja i anharmoničnosti prema relaciji (4). Udaljenost između minimuma pojedinih signala u apsorpcijskom spektru progresivno se smanjuje s povećanjem valne duljine uslijed anharmonične prirode kemijske veze te zbog činjenice da su ravnotežne udaljenosti u molekuli joda značajno različite za osnovno i pobuđeno elektronsko stanje. Ta pojava uzrokuje preklapanje signala pri većim iznosima valne duljine, dok su pri nižim valnim duljinama minimumi ravnomjerno raspoređeni. Iz literature je preuzeta asignacija signala pri valnoj duljini od 514,30 nm koji odgovara prijelazu $v'' = 0 \rightarrow v' = 43$, iz nultog osnovnog elektronskog i vibracijskog stanja u vibracijsku razinu pobuđenog tripletnog elektronskog stanja čiji je vibracijski kvantni broj 43. Svaki idući minimum, prema višim vrijednostima valne duljine, odgovara prijelazu u progresivno manje vibracijske razine u pobuđenom elektronskom stanju b. Iz ovisnosti valnog broja fotona, $\tilde{\nu}_{\text{aps}}$ o članu $\left(v' + \frac{1}{2} \right)$ moguće je pomoću linearne regresije odrediti vrijednosti parametara $(\tilde{T}'_e - G''(0))$, ω_e' i $\omega_e' x_e'$ koji karakteriziraju termove vibracijskih stanja. Maksimum promatrane jednadžbe (4) odgovara

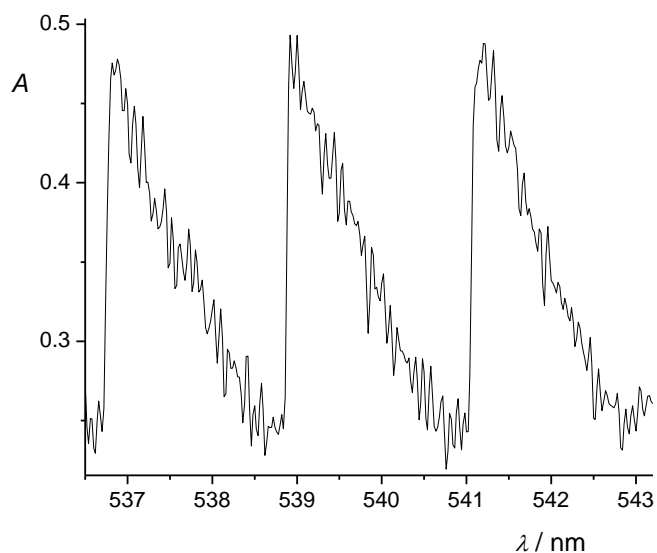
energiji E^* , iskazanoj u mjernoj jedinici valnog broja, koja je potrebna da se molekula joda pobudi iz osnovnog vibracijskog i elektronskog stanja X na granicu stanja disocijacije u pobuđenom elektronskom stanju b (*slika 1*). Izjednačavanjem prve derivacije relacije (4) po varijabli v' sa 0 dobiva se vibracijski kvantni broj razine iznad koje dolazi do disocijacije molekule joda i taj izraz poprima oblik

$$v'_{\text{maks.}} = \frac{\omega_e'}{2\omega_e'x_e'} \quad (5)$$

Uvrštavanjem dobivenog izraza (5), odnosno maksimalnog vibracijskog kvantnog broja prije stanja disocijacije molekule joda, $v'_{\text{maks.}}$, u relaciju (4) može se odrediti energija E^* . Dobivene vrijednosti E^* i $(\tilde{T}_e' - G''(0))$ se mogu iskoristiti za izračun klasične energije disocijacije \tilde{D}_e' u stanju b prema relaciji

$$\tilde{D}_e' = E^* - (\tilde{T}_e' - G''(0)) \quad (6)$$

Svaki signal u apsorpcijskom spektru posjeduje širinu zbog rotacijskih prijelaza koji su superponirani na vibracijske prijelaze (*slika 2*). Vrijednost koju je potrebno očitati za ovu analizu je prijelaz koji ne mijenja rotacijsko stanje, odnosno odgovara prijelazu kod kojeg vrijedi $\Delta J = 0$. Skupina takvih prijelaza naziva se Q-granom. Vrpce u Q-grani se ne pojavljuju u apsorpcijskim signalima jer su takvi prijelazi, $\Delta J = 0$, zabranjeni za prijelaz iz osnovnog u pobuđeno elektronsko stanje. No, ako bi vrpce Q-grane bile prisutne, nalazile bi se blizu rubova na visoko energijskim stranama svakog signala, odnosno na onoj strani signala s većim valnim brojem ili manjom valnom duljinom. Ravnotežne internuklearne udaljenosti joda u stanju X i stanju b su značajno različite, što dovodi do različitih rotacijskih konstanti i energija za istu promjenu rotacijskog stanja, a posljedično i različitih preklapanja pojedinih vibracijskih prijelaza.



Slika 2. Apsorpcijski spektar molekule joda u plinskoj fazi pri 50 °C u rasponu valnih duljina od 536 do 543 nm.

U ovoj vježbi se za opis rotacijskih stanja molekule joda, za oba promatrana elektronska stanja, koristi aproksimacija krutog rotora i stoga su rotacijski termovi definirani na način

$$F(J) = \tilde{B}J(J + 1), \quad J \in \mathbb{N}_0 \quad (7)$$

pri čemu je F oznaka rotacijskog terma u mjernoj jedinici valnog broja, \tilde{B} predstavlja rotacijsku konstantu u mjernoj jedinici valnog broja, a J je rotacijski kvantni broj koji poprima nenegativne cjelobrojne vrijednosti. Rotacijska konstanta za molekulu joda poprima oblik

$$\tilde{B} = \frac{h}{4\pi^2 m(^{127}\text{I}) r_e^2 c_0} \quad (8)$$

gdje je h Planckova konstanta, $m(^{127}\text{I})$ predstavlja masu atoma joda, r_e je ravnotežna udaljenost između atoma joda, a c_0 je brzina svjetlosti u vakuumu. Pregledom relacije (8) vidljivo je da su rotacijske energije molekule u zadanoj aproksimaciji u potpunosti određene ravnotežnom udaljenosti između atoma joda u promatranom elektronskom stanju.

Računalni pristup rovibranske analize molekule joda svodi se na određivanje PES-a u ovisnosti o internuklearnoj udaljenosti atoma joda za određeno elektronsko stanje. Za izračun PES-ova molekule joda važno je odabrati odgovarajuću kvantno-kemijsku metodu radi adekvatnog opisa interakcija svih elektrona. U skladu s time, nužno je koristiti *post* Hartree-Fock metode koje sadrže izraze za opis statičke i dinamičke korelacije elektrona. Također, bitnu ulogu ima i odabir osnovnog skupa jer atom joda sadrži 46 sržnih i 7 valentnih

elektrona. Nakon izračuna plohe na odgovarajućoj razini teorije, parametri Morseova potencijala, ravnotežna internuklearna udaljenost r_e , eksponencijalni parametar a i klasična energija disocijacije \tilde{D}_e određuju se nelinearnom regresijom iz relacije (1). Nadalje, poveznica konstante sile kemijske veze sa spomenutim parametrima Morseova potencijala dana je sa sljedećom relacijom

$$k = 2a^2\tilde{D}_e hc_0 \quad (9)$$

Određivanjem konstante sile kemijske veze i ravnotežne udaljenosti atoma moguće je zatim izračunati klasični valni broj ω_e prema jednadžbi

$$\omega_e = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (10)$$

gdje μ predstavlja reduciranu masu koja je u slučaju molekule joda jednaka polovici mase atoma joda. Iz tih parametara dalje se mogu dobiti iznosi klasičnog valnog broja te anharmoničnosti koji definiraju energije vibracijskih termova prema sljedećoj relaciji

$$\omega_e x_e = \frac{\omega_e^2}{4\tilde{D}_e} \quad (11)$$

Vibracijske termove promatranog elektronskog stanja moguće je okarakterizirati pomoću relacija (7) i (8) uz poznatu vrijednosti ravnotežne udaljenosti atoma joda r_e .

IZVEDBA EKSPERIMENTA

U ovoj vježbi se pomoću spektrofotometra Varian Cary 5 određuje VIS apsorpcijski spektar joda u plinskoj fazi pri 50 °C. Umetnite kivetu sa zapečaćenim poklopcem, u kojoj se nalaze kristali joda, u utor za kivete unutar spektrofotometra. Podesite temperaturu na termostatu unutar kontrolnog programa na 50 °C i pričekajte da se uzorak istermostatira. Podesite raspon valnih duljina na 500–650 nm i integracijsko vrijeme na 0,4 s. Postavite visinu proreza na *full*. Pritisnite tipku *Start* kako bi započeli sa snimanjem apsorpcijskog spektra molekularnog joda u plinovitom stanju. Detaljne smjernice za provedbu snimanja apsorpcijskog spektra molekularnog joda nalaze se u „Upute za snimanje VIS apsorpcijskog spektra“.

Nadalje, pomoću radne stanice se izračunava PES molekule joda u osnovnom elektronskom stanju X prema uputstvima napisanim u „Upute za provedbu kvantno-kemijskih proračuna“. U tom postupku potrebno je nacrtati molekulu joda, definirati u odgovarajućem

programu internu koordinatu veze i postaviti broj točaka izračuna PES-a na 34 te pomak interne koordinate na 0,10 Å. U tekstu „Upute za provedbu kvantno-kemijskih proračuna“ naznačena je i adekvatna razina teorije koju je potrebno odabrati prije same provedbe kvantno-kemijskog proračuna.

Po završetku kvantno-kemijskog proračuna određivanja PES-a molekule joda u osnovnom stanju X, za dani interval internuklearnih udaljenosti, potrebno je napraviti izvoz podataka u program Excel i nadalje pristupiti provedbi nelinearne regresije. Prema naputku u „Upute za provedbu nelinearne regresije“ provedite nelinearnu regresiju nad izračunanim podacima za određivanje parametara modela Morseova potencijala za promatrano osnovno elektronsko stanje molekule joda. Parametri tog modela uključuju klasičnu energiju disocijacije iz osnovnog elektronskog stanja, \tilde{D}_e'' , koeficijent a'' i ravnotežnu internuklearnu udaljenost r_e'' . Ostale parametre opisa anharmoničkog oscilatora izračunajte prema relacijama (9), (10) i (11), što uključuje konstantu sile kemijske veze, k'' , klasični valni broj, ω_e'' , te anharmoničnost, $\omega_e'' x_e''$. Izračunajte rotacijsku konstantu molekule joda, \tilde{B} , u aproksimaciji krutog rotora koristeći izračunanu vrijednost ravnotežne internuklearne udaljenosti, r_e'' , pomoću izraza (8).

Naposljetku, na temelju svih dobivenih vrijednosti izračunajte energiju pobuđenja slobodnog atoma joda, $E(I^*)$, za prijelaz ${}^2P_{1/2} \leftarrow {}^2P_{3/2}$, prema relaciji

$$E(I^*) = hc_0(\tilde{T}_e' + \tilde{D}_e' - \tilde{D}_e'') \quad (12)$$

pri čemu je h Planckova konstanta, a c_0 je brzina svjetlosti u vakuumu. U nastavku su priložene tablice literaturnih vrijednosti parametara opisa anharmoničkog oscilatora za molekulu joda u pobuđenom tripletnom stanju b (tablica 1) te izračunanih vrijednosti opisa anharmoničkog oscilatora za osnovno stanje X (tablica 2).

Tablica 1. Parametri Morseova potencijala, modela anharmoničkog oscilatora i rotacijska konstanta molekule joda za pobuđeno tripletno elektronsko stanje b (${}^3\Pi_{0u}^+$)

Parametri	Literaturne vrijednosti ⁱⁱⁱ
$\tilde{D}_e' / \text{cm}^{-1}$	4381,2
$a' / 10^{10} \text{Å}^{-1}$	1,84
$r_e' / \text{Å}$	3,03

$k' / \text{N m}^{-1}$	59,04
$\omega_e' / \text{cm}^{-1}$	125,67
$\omega_e' x_e' / \text{cm}^{-1}$	0,75
$\tilde{B}_e' / \text{cm}^{-1}$	0,0290

Tablica 2. Parametri Morseova potencijala, modela anharmoničkog oscilatora i rotacijska konstanta molekule joda za osnovno elektronsko stanje X ($^1\Sigma_g^+$)

Parametri	Izračunane vrijednosti
$\tilde{D}_e'' / \text{cm}^{-1}$	21264,25
$a'' / 10^{10} \text{ \AA}^{-1}$	1,23
$r_e'' / \text{ \AA}$	2,86
$k'' / \text{N m}^{-1}$	127,81
$\omega_e'' / \text{cm}^{-1}$	184,90
$\omega_e'' x_e'' / \text{cm}^{-1}$	0,40
$\tilde{B}_e'' / \text{cm}^{-1}$	0,0650

PRIKAZ I OBRADA MJERNIH PODATAKA

Pobuđeno elektronsko stanje b

1. Snimite apsorpcijski VIS spektar molekularnog joda u rasponu valnih duljina od 500 do 650 nm. Asignirajte opažene linije vibracijskih prijelaza superponiranih na $X \rightarrow b$ elektronski prijelaz.

2. Odredite klasični valni broj ω_e' i koeficijent anharmoničnosti $\omega_e' x_e'$ za vibracijska stanja pobuđenog elektronskog stanja joda b iz prikaza $\tilde{\nu}_{\text{aps}}$ naspram $(v'+1/2)$ na temelju jednadžbe (4). Prijelaz pri valnoj duljini od 514,30 nm odgovara prijelazu $v'' = 0 \rightarrow v' = 43$, iz osnovnog elektronskog i nultog vibracijskog stanja u vibracijsku razinu pobuđenog tripletnog elektronskog stanja čiji je vibracijski kvantni broj 43. Iz te obrade podataka odredite i energiju

elektronskog prijelaza $X \rightarrow b$ koji se događa između nultih, osnovnih vibracijskih stanja oba elektronska stanja.

3. Odredite energiju disocijacije molekule joda iz pobuđenog elektronskog stanja b pomoću izraza (5) i (6).

Osnovno elektronsko stanje X

1. Izračunajte PES molekule joda za osnovno elektronsko stanje X u rasponu internuklearne udaljenosti od 2,20 Å do 5,50 Å. Nad dobivenim rezultatom izvršite konverziju mjerne jedinice, iz hartreeja u recipročne centimetre, te isprintajte PES molekule joda u ispitanom rasponu internuklearne udaljenosti.

2. Odredite klasičnu energiju disocijacije iz osnovnog elektronskog stanja, \tilde{D}_e'' , koeficijent a'' i ravnotežnu internuklearnu udaljenost r_e'' za stanje X molekule joda provedbom nelinearne regresije. Također, odredite konstantu sile kemijske veze, k'' , klasični valni broj, ω_e'' , te anharmoničnost, $\omega_e'' x_e''$ računski prema relacijama (9), (10) i (11).

3. Izračunajte rotacijsku konstantu molekule joda, \tilde{B} , u aproksimaciji krutog rotora prema relaciji (8), koristeći ravnotežnu internuklearnu udaljenost r_e'' izračunanu nelinearnom regresijom.

4. Izračunajte energiju pobuđenja slobodnog atoma joda, $\tilde{E}(I^*)$, pomoću izraza (12).

i. Ira N. Levine, *Molecular Spectroscopy*, John Wiley & Sons, New York, 1975.

ii. J. C. Williamson, *J. Chem. Educ.* **84** (2007) 1355-1359.