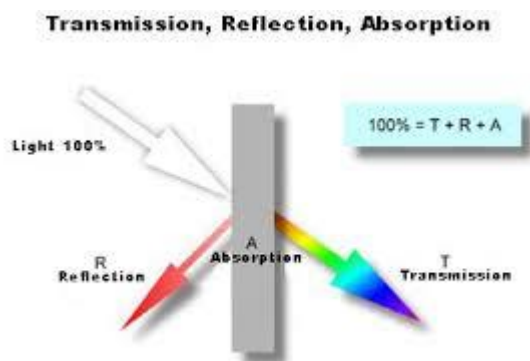


Molekulska spektroskopija: elektronski prijelazi, rotacijska i vibracijska spektroskopija

Seminar

10.6.2025.

1. Intenzitet svjetlosti valne duljine 256 nm koja prolazi kroz kivetu debljine 1 mm, napunjenu otopinom C_6H_6 koncentracije $c(C_6H_6) = 5 \text{ mmol dm}^{-3}$, reducira se na 16 % početne vrijednosti. Izračunajte apsorbanciju i molarni apsorpcijski koeficijent. Izračunajte transmitanciju istog uzorka u kiveti debljine 2 mm.



$$T = \frac{I_{\text{trans}}}{I_0}$$

$$A = \log \frac{I_0}{I_{\text{trans}}}$$

$$A = -\log \frac{I_{\text{trans}}}{I_0} = -\log T$$

$$I_{\text{trans}} = 0,16 \cdot I_0 \longrightarrow \frac{I_{\text{trans}}}{I_0} = 0,16 = T$$

$$A = -\log T = 0,7959$$

Beer-Lambertov zakon

$$A = \varepsilon \cdot l \cdot c$$

Molarni apsorpcijski koeficijent; ne ovisi o koncentraciji i duljini optičkog puta, već o valnoj duljini i vrsti tvari

$$\varepsilon = \frac{A}{l \cdot c} = \frac{0,7959}{0,1 \text{ cm} \cdot 5 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}}$$

$$\varepsilon = 1592 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$$

$$T(l = 2 \text{ mm}) = 10^{-A(l=2 \text{ mm})}$$

$$A(l = 2 \text{ mm}) = 2 \cdot A(l = 1 \text{ mm}) = 1,5918$$

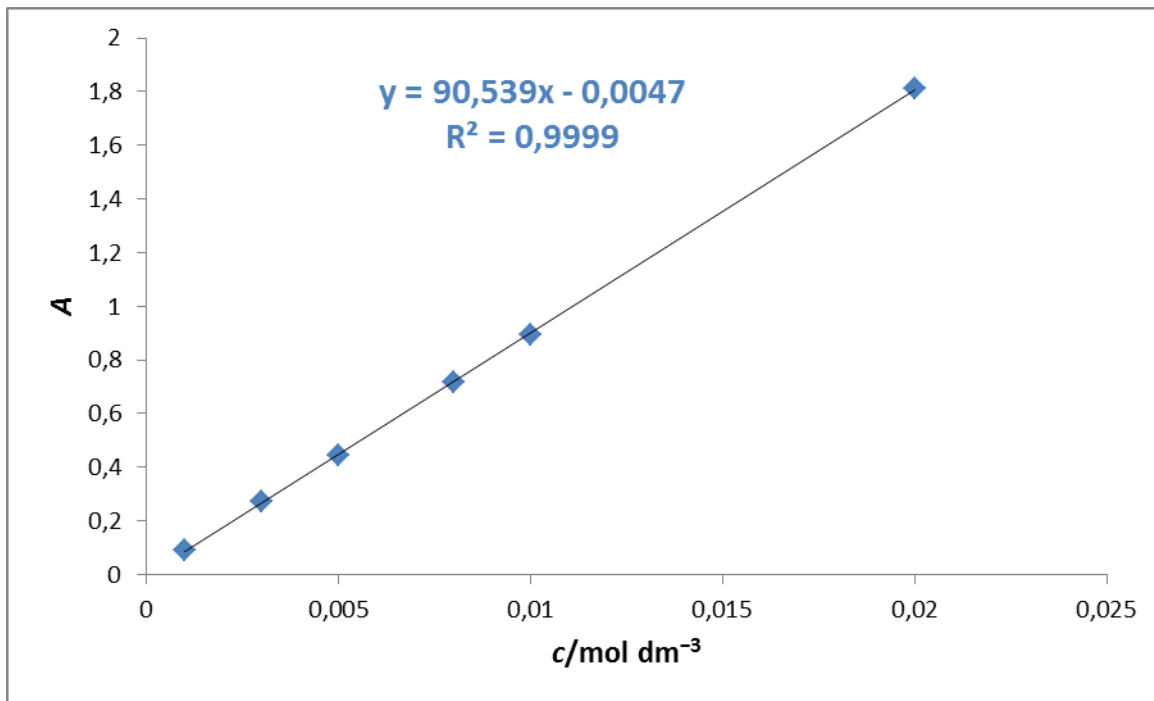
$$T(l = 2 \text{ mm}) = 10^{-1,5918} = 0,0256$$

2. Mjerena je apsorbancija Br_2 otopljenog u CCl_4 , pri čemu je korištena kiveta debljine 2 mm, te su dobiveni sljedeći podatci:

$10^3 c/\text{mol dm}^{-3}$	1	3	5	8	10	20
A	0,089	0,273	0,443	0,716	0,896	1,810

Odredite molarni apsorpcijski koeficijent za valnu duljinu pri kojoj su mjerene apsorbancije te koncentraciju broma u otopini čija transmitancija iznosi 30,5 %.

$$A = \varepsilon \cdot l \cdot c$$



Nagib pravca $\longrightarrow$ $\varepsilon \cdot l = 90,539 \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3$

$$l = 2 \text{ mm} = 0,2 \text{ cm}$$

$$\varepsilon = 452,7 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$$

$$A_{c_x} = -\log T_{c_x} = -\log(0,305) = 0,5157 \longrightarrow$$

Uvrstiti u
jednadžbu
pravca za Y

$$c_x = 5,75 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$$

3. Odredite momente tromosti sljedećih linearnih molekula:

a) H_2 , $r = 74,1 \text{ pm}$

b) HF , $r = 91,7 \text{ pm}$

c) HBr , $r = 141,4 \text{ pm}$

d) CO_2 , $r_{\text{CO}} = 116,2 \text{ pm}$

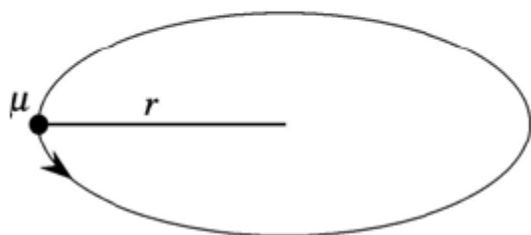
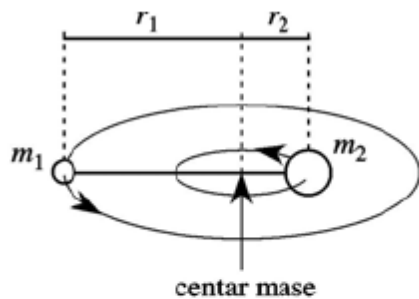
e) HCN , $r_{\text{CH}} = 106,4 \text{ pm}$, $r_{\text{CN}} = 115,6 \text{ pm}$

f) HCCH , $r_{\text{CH}} = 105,8 \text{ pm}$, $r_{\text{CC}} = 120,8 \text{ pm}$.

$$\begin{aligned} I_a &= I_b \\ I_c &= 0 \end{aligned}$$

Linearne molekule

$$I = \sum_i m_i r_i^2$$



← 2-atomne molekule

$$I = \mu r^2$$

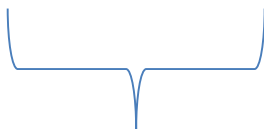
Reducirana masa

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

a) H₂

Prosječna relativna
atomska masa – iz PSE

$$I = \frac{m(\text{H}) \cdot m(\text{H})}{m(\text{H}) + m(\text{H})} \cdot r^2; \quad m(\text{H}) = A_r(\text{H}) \cdot u$$



μ

Unificirana atomska jedinica mase
 $u = 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

$$I = \frac{A_r(\text{H}) \cdot u}{2} \cdot r^2 = \frac{1,008 \cdot 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}{2} \cdot (7,41 \cdot 10^{-11} \text{ m})^2$$

$$I = 4,6 \cdot 10^{-48} \text{ kg m}^2$$

b) HF

$$I = \frac{A_r(\text{H}) \cdot A_r(\text{F}) \cdot u}{A_r(\text{H}) + A_r(\text{F})} \cdot r^2$$

$$I = 1,34 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2$$

c) HBr

$$I = 3,30 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2$$

d) CO₂

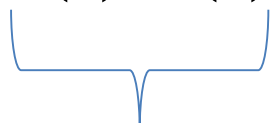


Centar mase molekule u centru
simetrije – središte C-atoma

Udaljenost atoma od centra mase:

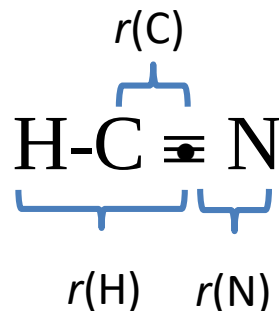
$$r(\text{C}) = 0; r(\text{O}) = r(\text{C}=\text{O}) = 116,2 \text{ pm}$$

$$I = m(\text{C}) \cdot r^2(\text{C}) + 2 \cdot m(\text{O}) \cdot r^2(\text{O})$$


nula

$$I = 2 \cdot A_r(\text{O}) \cdot u \cdot r^2(\text{O}) = 7,17 \cdot 10^{-46} \text{ kg m}^2$$

e) HCN



Centar mase molekule između C i N atoma

$$r(\text{N}) = r(\text{C}-\text{N}) - r(\text{C})$$

$$r(\text{H}) = r(\text{C}-\text{H}) + r(\text{C})$$

Uvjet za centar
mase

$$m(\text{H}) \cdot r(\text{H}) + m(\text{C}) \cdot r(\text{C}) = m(\text{N}) \cdot r(\text{N})$$

$$m(\text{H}) \cdot (r(\text{C}-\text{H}) + r(\text{C})) + m(\text{C}) \cdot r(\text{C}) = m(\text{N}) \cdot (r(\text{C}-\text{N}) - r(\text{C}))$$

$$r(\text{C}) = \frac{m(\text{N}) \cdot r(\text{C} - \text{N}) - m(\text{H}) \cdot r(\text{C} - \text{H})}{m(\text{H}) + m(\text{C}) + m(\text{N})}$$

$$r(\text{C}) = \frac{A_r(\text{N}) \cdot r(\text{C} - \text{N}) - A_r(\text{H}) \cdot r(\text{C} - \text{H})}{A_r(\text{H}) + A_r(\text{C}) + A_r(\text{N})} = 55,9 \text{ pm}$$

$$r(\text{N}) = r(\text{C} - \text{N}) - r(\text{C}) = 59,7 \text{ pm}$$

$$r(\text{H}) = r(\text{C} - \text{H}) + r(\text{C}) = 162,3 \text{ pm}$$

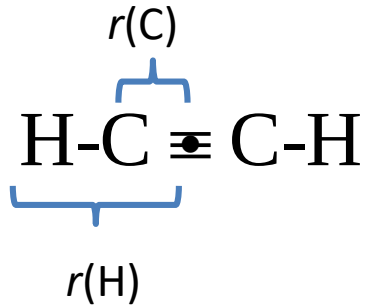


U metre

$$I = m(\text{H}) \cdot r^2(\text{H}) + m(\text{C}) \cdot r^2(\text{C}) + m(\text{N}) \cdot r^2(\text{N})$$

$$I = 1,89 \cdot 10^{-46} \text{ kg m}^2$$

f) HCCH



$$r(C) = \frac{r(C-C)}{2} = 60,4 \text{ pm}$$

$$r(H) = r(C-H) + \frac{r(C-C)}{2} = 166,2 \text{ pm}$$

$$I = 2 \cdot m(H) \cdot r^2(H) + 2 \cdot m(C) \cdot r^2(C)$$

$$I = 2,38 \cdot 10^{-46} \text{ kg m}^2$$

4. Odredite rotacijsku konstantu linearne molekule HCCH ($r_{\text{CH}} = 105,8 \text{ pm}$, $r_{\text{CC}} = 120,8 \text{ pm}$) izraženu u jedinicama frekvencije i jedinicama valnog broja.

$$E_r = \frac{h^2}{8\pi^2 \cdot I} J(J+1); J = 0, 1, 2, \dots \quad \text{Linearni rotori}$$

Rotacijski term

$$F(J) = \frac{E_r}{h} [\text{Hz}]$$

$$\tilde{F}(J) = \frac{E_r}{h \cdot c} [\text{m}^{-1}]$$

Rotacijska konstanta

$$B = \frac{h}{8\pi^2 \cdot I} [\text{Hz}]$$

$$\tilde{B} = \frac{h}{8\pi^2 \cdot I \cdot c} [\text{m}^{-1}]$$

$$F(J) = BJ(J+1)$$

$$\tilde{F}(J) = \tilde{B}J(J+1)$$

$$\begin{aligned}\tilde{B} &= \frac{h}{8\pi^2 \cdot I \cdot c} \\ &= \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}}{8\pi^2 \cdot 2,38 \cdot 10^{-46} \text{ kg m}^2 \cdot 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}}\end{aligned}$$

$$= 117,6 \text{ m}^{-1} = 1,176 \text{ cm}^{-1}$$

$$B = \frac{h}{8\pi^2 \cdot I} = 3,526 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} = 3,526 \cdot 10^{10} \text{ Hz}$$

5. Prijelaz $J = 1 \leftarrow J = 0$ molekule ^1HCl uzrokuje apsorpciju zračenja frekvencije od 620 GHz. Odredite rotacijsku konstantu i duljinu veze molekule ^1HCl te frekvenciju za odgovarajuću liniju molekule ^2HCl . Pretpostavite da je međunuklearna udaljenost jednaka za obje molekule.

$$A_r(^1\text{H}) = 1,008, A_r(^2\text{H}) = 2,014, A_r(\text{Cl}) = 35,453.$$

Apsorpcijski rotacijski spektar: $\Delta J = +1$

Linije u rotacijskom spektru (razlika dvaju termova)

$$\nu = F(J') - F(J'')$$

$$J'' = J$$

$$\nu = B(J+1)(J+2) - BJ(J+1)$$

$$J' = J + 1$$

....

$$\nu = 2B(J+1)$$

J – rotacijski kvantni broj nižeg stanja

Molekula ^1HCl $\nu(^1\text{HCl}) = 620 \text{ GHz}$

$$\nu = 2B(J+1) \xrightarrow{J=0} B = \frac{\nu}{2} = 310 \text{ GHz} = 3,1 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$$

Iz momenta tromosti, odredimo duljinu veze

$$B = \frac{h}{8\pi^2 \cdot I} = \frac{h}{8\pi^2 \cdot \mu \cdot r(\text{H-Cl})^2}$$



$$r(^1\text{H-Cl}) = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 \cdot B \cdot \mu}}$$

Relativna atomska
masa izotopa

Prosječna relativna
atomska masa

$$r(^1\text{H-Cl}) = \sqrt{\frac{h \cdot [A_r(^1\text{H}) + A_r(\text{Cl})]}{8\pi^2 \cdot B \cdot A_r(^1\text{H}) \cdot A_r(\text{Cl}) \cdot u}} = 1,29 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Pretpostavka o duljini veze u molekuli s izotopnom susptitucijom

$$r(^1\text{H-Cl}) = r(^2\text{H-Cl})$$

$$\nu(^2\text{HCl}) = ?$$


$$\frac{\nu(^2\text{HCl})}{\nu(^1\text{HCl})} = \frac{B(^2\text{HCl})}{B(^1\text{HCl})} = \frac{I(^1\text{HCl})}{I(^2\text{HCl})} = \frac{\mu(^1\text{HCl})}{\mu(^2\text{HCl})}$$

$$\nu(^2\text{HCl}) = \nu(^1\text{HCl}) \cdot \frac{\mu(^1\text{HCl})}{\mu(^2\text{HCl})}$$

$$\nu(^2\text{HCl}) = 319 \text{ GHz}$$

6. U dalekom infracrvenom području spektar H^{79}Br sastoji se od niza linija rastavljenih za $16,94 \text{ cm}^{-1}$.
Odredite moment tromosti i internuklearnu udaljenost za tu molekulu.

$$A_r(\text{H}) = 1,008, A_r(^{79}\text{Br}) = 78,918.$$

Daleko infracrveno i mikrovalno područje $\rightarrow$ rotacijski spektar

Linija u spektru = razlika termova $\tilde{\nu}(J+1 \leftarrow J) = 2\tilde{B}(J+1)$

Razmak među linijama $\tilde{\nu}(J+2 \leftarrow J+1) - \tilde{\nu}(J+1 \leftarrow J) = 2\tilde{B}(J+2) - 2\tilde{B}(J+1)$
 $= 2\tilde{B}$

$$2\tilde{B} = 16,94 \text{ cm}^{-1} \longrightarrow \tilde{B} = 8,47 \text{ cm}^{-1} = 847 \text{ m}^{-1}$$

$$I = \frac{h}{8\pi^2 \cdot c \cdot \tilde{B}}$$

$$I = 3,30 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2$$

$$r = \sqrt{\frac{I}{\mu}} = 1,413 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

7. Valni broj linije u apsorpcijskom rotacijskom spektru neke molekule ^1HX iznosi $143,7 \text{ cm}^{-1}$ dok kod molekule ^2HX iznosi $73,8 \text{ cm}^{-1}$. Nađite vrstu atoma X (pretpostavite da je međunuklearna udaljenost jednaka za obje molekule).

$$A_r(^1\text{H}) = 1,008, A_r(^2\text{H}) = 2,014.$$

Isti prijelaz kod obje molekule: općenito $J+1 \leftarrow J$

$$\frac{\nu(^1\text{HX})}{\nu(^2\text{HX})} = \frac{B(^1\text{HX})}{B(^2\text{HX})} = \frac{I(^2\text{HX})}{I(^1\text{HX})} = \frac{\mu(^2\text{HX})}{\mu(^1\text{HX})}$$

$$\frac{\nu(^1\text{HX})}{\nu(^2\text{HX})} = \frac{A_r(^2\text{H}) \cdot A_r(^1\text{H}) + A_r(^2\text{H}) \cdot A_r(\text{X})}{A_r(^2\text{H}) \cdot A_r(^1\text{H}) + A_r(^1\text{H}) \cdot A_r(\text{X})}$$

$$A_r(X) = \frac{[\nu(^2\text{HX}) - \nu(^1\text{HX})] \cdot A_r(^2\text{H}) \cdot A_r(^1\text{H})}{\nu(^1\text{HX}) \cdot A_r(^1\text{H}) - \nu(^2\text{HX}) \cdot A_r(^2\text{H})}$$

$$A_r(X) = 37,2$$

Najbliže prosječnoj relativnoj atomskoj masi klora → izotop klora: ^{37}Cl

8. U području između 200 i 300 cm^{-1} , rotacijski spektar molekule H^{35}Cl sastoji se od linija s valnim brojevima 207, 227, 247, 267 i 287 cm^{-1} . Odredite kojim prijelazima pripadaju te linije!



Jednaki razmaci među linijama: $2\tilde{B} = 20 \text{ cm}^{-1}$
 $\tilde{B} = 10 \text{ cm}^{-1}$

Koji prijelazi? $\rightarrow J = ?$



Niže stanje svakog prijelaza

$$\tilde{\nu} = 2\tilde{B}(J + 1) \longrightarrow J = \frac{\tilde{\nu}}{2\tilde{B}} - 1$$

$$\tilde{\nu}_1 = 207 \text{ cm}^{-1} \rightarrow J_1 = 9,35 \approx 9$$

...

$$J_2 = 10$$

$$J_3 = 11$$

$$J_4 = 12$$

$$J_5 = 13$$

Odgovarajući
prijelazi:

$$J = 10 \leftarrow J = 9$$

$$J = 11 \leftarrow J = 10$$

$$J = 12 \leftarrow J = 11$$

$$J = 13 \leftarrow J = 12$$

$$J = 14 \leftarrow J = 13$$

9. U bliskom infracrvenom spektru ugljikova monoksida nalazi se intenzivna vrpca kod 2144 cm^{-1} i jedna slabija kod 4180 cm^{-1} . Odredite klasični valni broj, konstantu sile i molarnu energiju nulte točke.

Bliski infracrveni spektar – vibracije molekula

Primjena anharmonijskog oscilatora

Vibracijski term
anharmonijskog
oscilatora

$$\tilde{G}(v) = \frac{E(v)}{hc} = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - x_e \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

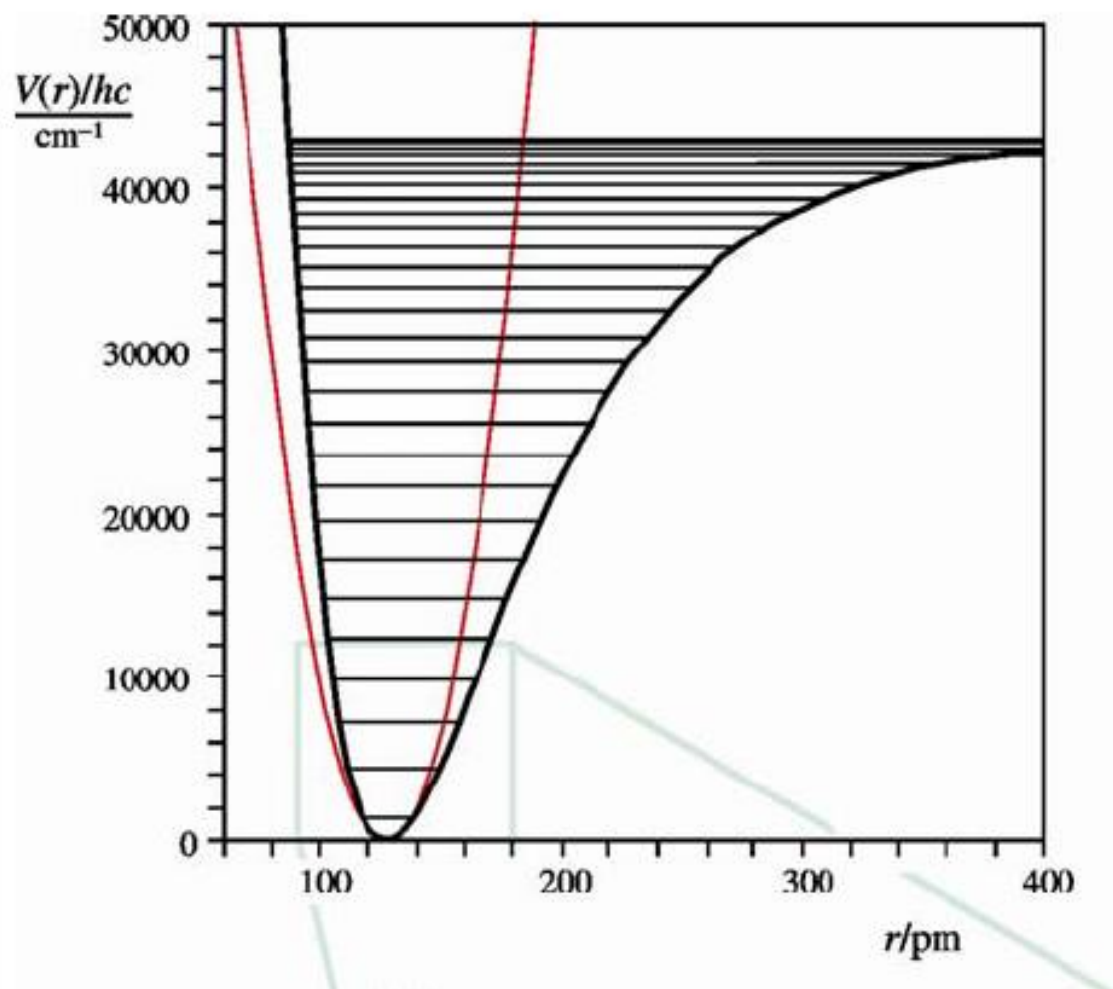
Vibracijski
kvantni broj

$v = 0, 1, 2, \dots$

Klasični valni broj za vibraciju
dvoatomne molekule

$$\omega_e = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Konstanta
anharmoničnosti



Kad bi bila riječ o H₂O, onda bismo u spektru vidjeli samo jednu vrpca – svi razmaci jednaki, a dozvoljeni samo prijelazi među susjednim linijama

Izborna pravila:

$\Delta v = 1, 2, \dots$

$v = 1 \leftarrow v = 0$ ← osnovna vrpca - najintenzivnija

$v = 2 \leftarrow v = 0$ } gornji (viši) tonovi (harmonici)

$v = 3 \leftarrow v = 0$ } – slabijeg intenziteta

...

$v = 2 \leftarrow v = 1$ vruće vrpce – značajnije pri visokim temperaturama

...

$$\tilde{\nu}(1 \leftarrow 0) = 2144 \text{ cm}^{-1}$$

$$\tilde{\nu}(2 \leftarrow 0) = 4180 \text{ cm}^{-1}$$

$$\tilde{\nu}(1 \leftarrow 0) = \tilde{G}(1) - \tilde{G}(0)$$

$$\tilde{\nu}(2 \leftarrow 0) = \tilde{G}(2) - \tilde{G}(0)$$

$$\tilde{\nu}(1 \leftarrow 0) = \frac{3}{2}\omega_e - \left(\frac{3}{2}\right)^2 x_e \omega_e - \left(\frac{1}{2}\omega_e - \left(\frac{1}{2}\right)^2 x_e \omega_e\right)$$

$$\tilde{\nu}(2 \leftarrow 0) = \frac{5}{2}\omega_e - \left(\frac{5}{2}\right)^2 x_e \omega_e - \left(\frac{1}{2}\omega_e - \left(\frac{1}{2}\right)^2 x_e \omega_e\right)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\nu}(1 \leftarrow 0) &= \omega_e - 2x_e \omega_e = 2144 \text{ cm}^{-1} \\ \tilde{\nu}(2 \leftarrow 0) &= 2\omega_e - 6x_e \omega_e = 4180 \text{ cm}^{-1} \end{aligned} \right\}$$

$$\omega_e = 2252 \text{ cm}^{-1}$$

$$x_e \omega_e = 54 \text{ cm}^{-1}$$

$$\omega_e = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \Rightarrow k = \omega_e^2 4\pi^2 c^2 \mu \quad \longrightarrow \quad \text{CO molekula}$$

$$k = \omega_e^2 4\pi^2 c^2 \frac{A_r(\text{C}) \cdot A_r(\text{O})}{A_r(\text{C}) + A_r(\text{O})} \cdot u \quad k = 2050 \text{ N m}^{-1}$$

$$E(v) = h \cdot c \cdot \tilde{G}(v) \quad \text{Energijske razine kod vibracija}$$

Energija nulte točke: najniža energija $\rightarrow E(0)$

Molarna energija nulte točke: $E_m(0) = E(0) \cdot N_A$

$$E_m(0) = h \cdot c \cdot \tilde{G}(0) \cdot N_A$$

$$E_m(0) = h \cdot c \cdot N_A \cdot \left(\frac{1}{2} \omega_e - \frac{1}{4} x_e \omega_e \right) = 13631 \text{ J mol}^{-1}$$

$$= 13,6 \text{ kJ mol}^{-1}$$



Vibracijski term koji odgovara najnižoj
dozvoljenoj energijskoj razini

10. Razlika energija između nultog i prvog vibracijskog stanja molekule HBr je $30,6 \text{ kJ mol}^{-1}$, a između desetog i jedanaestog iznosi $19,8 \text{ kJ mol}^{-1}$. Kod kojeg valnog broja će se nalaziti osnovna vibracijska vrpca i prvi viši ton?

$$E_m(1) - E_m(0) = 30,6 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$E_m(11) - E_m(10) = 19,8 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\tilde{\nu}(1 \leftarrow 0) = ?$$

$$\tilde{\nu}(2 \leftarrow 0) = ?$$

$$E_m(\nu) = h \cdot c \cdot \tilde{G}(\nu) \cdot N_A$$

$$E_m(1) - E_m(0) = h \cdot c \cdot N_A \cdot [\tilde{G}(1) - \tilde{G}(0)]$$

$$E_m(11) - E_m(10) = h \cdot c \cdot N_A \cdot [\tilde{G}(11) - \tilde{G}(10)]$$

$$\tilde{G}(1) - \tilde{G}(0) = \frac{E_m(1) - E_m(0)}{h \cdot c \cdot N_A} = 255798 \text{ m}^{-1} = 2558 \text{ cm}^{-1} \longrightarrow \text{Osnovna vrpca}$$

$\tilde{\nu}(1 \leftarrow 0)$

$$\tilde{G}(11) - \tilde{G}(10) = \frac{E_m(11) - E_m(10)}{h \cdot c \cdot N_A} = 165516 \text{ m}^{-1} = 1655 \text{ cm}^{-1}$$

Da bi odredili 1. viši ton, moramo odrediti parametre:

ω_e
 $x_e \omega_e$

Riješiti sustav!

$$\tilde{G}(1) - \tilde{G}(0) = \omega_e - 2x_e \omega_e = 2558 \text{ cm}^{-1}$$

$$\tilde{G}(11) - \tilde{G}(10) = \omega_e - 22x_e \omega_e = 1655 \text{ cm}^{-1}$$

$$x_e \omega_e = 45,15 \text{ cm}^{-1}$$

$$\omega_e = 2648,3 \text{ cm}^{-1}$$

$$\tilde{\nu}(2 \leftarrow 0) = \tilde{G}(2) - \tilde{G}(0) = 2\omega_e - 6x_e\omega_e = 5026 \text{ cm}^{-1}$$

11. Valni broj koji odgovara vibracijskim energijama nivoa molekule klora dan je izrazom * gdje je v vibracijski kvantni broj. Izračunajte energiju nulte točke i klasičnu energiju disocijacije te molekule.

$$* \quad \tilde{G}(v)/\text{cm}^{-1} = 564,9 \left(v + \frac{1}{2} \right) - 4,0 \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

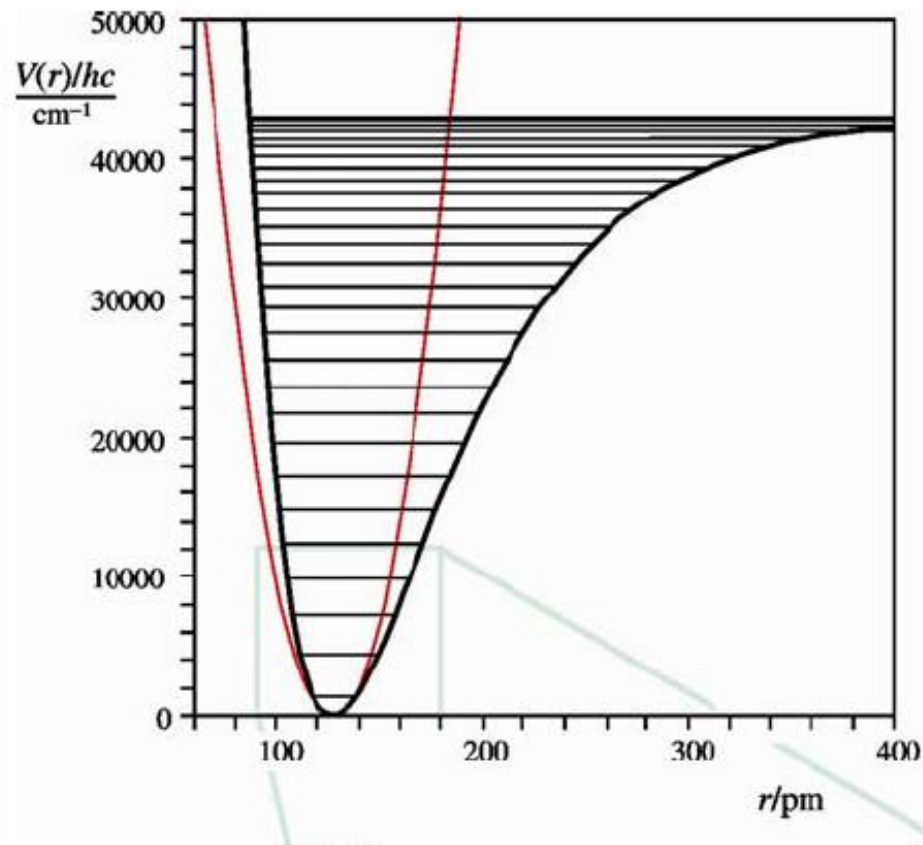
Energija disocijacije

$$\tilde{G}(v_{\text{max}} + 1) - \tilde{G}(v_{\text{max}}) = 0$$

$$E_{\text{d,klas.}} = E(v_{\text{max}}) = h \cdot c \cdot \tilde{G}(v_{\text{max}})$$

$$E_{\text{d}} = E(v_{\text{max}}) - E(0)$$

$$v_{\text{max}} = \frac{1}{2x_e} - 1$$



U klasičnom pristupu min. energija: $E = 0$
→ minimum na krivulji potencijalne energije

U kvantno-mehaničkom pristupu
min. energija: $E(0) > 0$

$$x_e \omega_e = 4,0 \text{ cm}^{-1} \longrightarrow x_e = 7,081 \cdot 10^{-3}$$

$$\omega_e = 564,9 \text{ cm}^{-1}$$

$$\tilde{G}(v)/\text{cm}^{-1} = 564,9 \left(v + \frac{1}{2} \right) - 4,0 \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$



 $V = 0$

$$E(0) = h \cdot c \cdot \tilde{G}(0) = 5,591 \cdot 10^{-21} \text{ J}$$

$$E_{\text{d,klas}} = E(v_{\text{max}}) = h \cdot c \cdot \tilde{G}(v_{\text{max}})$$

$$v_{\text{max}} = \frac{1}{2x_e} - 1 = 69,6 \approx 70$$

$$E_{\text{d,klas}} = E(70) = h \cdot c \cdot \tilde{G}(70)$$

$$= 3,96 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$



 Zaokružiti na viši cijeli broj (razlog:
 izvod preko derivacije funkcije G)

12. Vibracijski termovi prva dva vibracijska nivoa molekule H^{35}Cl iznose $1481,86 \text{ cm}^{-1}$ i $4367,5 \text{ cm}^{-1}$. Odredite valni broj osnovne i prve vruće vibracijske vrpce navedene molekule. Koliko vibracijskih nivoa očekujete da ima navedena molekula?

Vibracijski term
anharmonijskog
oscilatora

$$\tilde{G}(v) = \frac{E(v)}{hc} = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - x_e \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

$$\tilde{G}(0) = 1481,86 \text{ cm}^{-1}$$

$$\tilde{G}(1) = 4367,5 \text{ cm}^{-1}$$

$$\tilde{\nu}(1 \leftarrow 0) = ?$$

$$\tilde{\nu}(1 \leftarrow 0) = \tilde{G}(1) - \tilde{G}(0) = 2885,64 \text{ cm}^{-1} = \omega_e - 2x_e\omega_e$$

$$\tilde{\nu}(2 \leftarrow 1) = ?$$

$$\tilde{\nu}(2 \leftarrow 1) = \tilde{G}(2) - \tilde{G}(1) = \omega_e - 4x_e\omega_e$$

$$\tilde{G}(0) = \frac{1}{2}\omega_e - \frac{1}{4}x_e\omega_e$$

$$\tilde{G}(1) = \frac{3}{2}\omega_e - \frac{9}{4}x_e\omega_e$$

Riješiti sustav jednažbi

$$x_e\omega_e = 52,02 \text{ cm}^{-1}$$

$$\omega_e = 2989,7 \text{ cm}^{-1}$$



$$x_e = 1,74 \cdot 10^{-2}$$

$$\tilde{\nu}(2 \leftarrow 1) = \tilde{G}(2) - \tilde{G}(1) = 2781,6 \text{ cm}^{-1}$$

$$v_{\max} = \frac{1}{2x_e} - 1 = 27,7 \approx 28$$