

### 5<sup>η</sup> Σειρά Ασκήσεων Μοριακής Φασματοσκοπίας

- Δίνονται οι φασματοσκοπικές σταθερές του IF:  $\omega_e = 610.258 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_e x_e = 3.141 \text{ cm}^{-1}$ ,  $B_e = 0.279711 \text{ cm}^{-1}$ ,  $a_e = 0.001874 \text{ cm}^{-1}$ . α) Να υπολογισθεί το μήκος του δεσμού. β) Να γραφούν οι γενικές σχέσεις που δίνουν τις θέσεις των κορυφών των κλάδων P και R για την πρώτη υπέρτονη δονητική μετάπτωση. γ) Να υπολογισθούν οι θέσεις (σε  $\text{cm}^{-1}$ ) των τρίτων κορυφών των κλάδων P και R της πρώτης υπέρτονης.
- Το ακετυλένιο εκτελεί τις εξής κανονικές δονήσεις:  $\nu_1$  συμμετρική έκταση H,  $\nu_2$  έκταση  $\text{C}\equiv\text{C}$ ,  $\nu_3$  ασύμμετρη έκταση H,  $\nu_4$  κάμψη trans και  $\nu_5$  κάμψη cis, οι οποίες ακολουθούν την ενεργειακή κατάταξη  $\nu_4 < \nu_5 < \nu_2 < \nu_3 < \nu_1$ . Στο απλοποιημένο φάσμα που ακολουθεί εμφανίζονται πολύ ισχυρές κορυφές (vs) από θεμελιώδεις μεταπτώσεις, μέτριας εντάσεως (m) από συνδυασμούς διεγέρσεως δύο κανονικών τρόπων δονήσεων και ασθενείς (w) από υπέρτονες ή άλλες μεταπτώσεις συνδυασμού. Υπολογίστε τις δονητικές σταθερές κάθε κανονικού τρόπου δονήσεως και συμπληρώστε τον πίνακα με την ανάλυση του κυματαριθμού κάθε κορυφής ώστε να φαίνεται η μεταβολή των κβαντικών αριθμών κάθε εμπλεκόμενου τρόπου δονήσεως (π.χ.  $\nu_3 + 2 \nu_2$ ). Θυμηθείτε ότι στο υπέρυθρο ενεργές είναι μόνο οι μεταπτώσεις στις οποίες μεταβάλλεται η διπολική ροπή κατά τη δόνηση.

$\alpha/\alpha$	Θέση ( $\text{cm}^{-1}$ )	Ενταση	Χαρακτηρισμός
1	730	vs	
2	1340	m	
3	1950	w	
4	2700	m	
5	3290	vs	
6	3310	w	
7	3900	m	
8	4100	m	
9	5260	m	
10	6660	m	

$$\nu_1 =$$

$$\nu_2 =$$

$$\nu_3 =$$

$$\nu_4 =$$

$$\nu_5 =$$