

5^η Σειρά Ασκήσεων Μοριακής Φασματοσκοπίας

1. Δίνονται οι εξής δονητικές σταθερές για το μόριο $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$: $\omega_1 = 1354.07 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_2 = 672.95 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_3 = 2396.30 \text{ cm}^{-1}$, $x_{11} = -3.10 \text{ cm}^{-1}$, $x_{22} = 1.59 \text{ cm}^{-1}$, $x_{33} = -12.50 \text{ cm}^{-1}$, $x_{12} = -5.37 \text{ cm}^{-1}$, $x_{13} = -19.27 \text{ cm}^{-1}$, $x_{23} = -12.51 \text{ cm}^{-1}$, $g_{22} = -0.62 \text{ cm}^{-1}$. Υπολογίστε τις ενέργειες των δονητικών σταθμών $(v_1, v_2(l_2), v_3) = (1, 0(0), 0)$ και $(v_1, v_2(l_2), v_3) = (0, 2(0), 0)$ και τη διαφορά τους. Οι στάθμες είναι και οι δυο συμμετρίας Σ_g^+ και παρατηρείται συντονισμός Fermi λόγω της μικρής ενεργειακής τους διαφοράς (την οποία καλείσθε να υπολογίσετε σε αυτή την άσκηση), με αποτέλεσμα να απομακρυνθούν μεταξύ τους.
2. Το ακετυλένιο εκτελεί τις εξής κανονικές δονήσεις: v_1 συμμετρική έκταση H, v_2 έκταση $\text{C}\equiv\text{C}$, v_3 ασύμμετρη έκταση H, v_4 κάμψη trans και v_5 κάμψη cis, οι οποίες ακολουθούν την ενεργειακή κατάταξη $v_4 < v_5 < v_2 < v_3 < v_1$. 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. $v_3 + 2 v_2$). Θυμηθείτε ότι στο υπέρυθρο ενεργές είναι μόνο οι μεταπτώσεις στις οποίες μεταβάλλεται η διπολική ροπή κατά τη δόνηση.

α/α	Θέση (cm^{-1})	Ενταση	
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	

$$v_1 =$$

$$v_4 =$$

$$v_2 =$$

$$v_5 =$$

$$v_3 =$$