

$\lambda, \nu, \tilde{\nu}$

EMZ: valna duljina, frekvencija, valni broj, energija

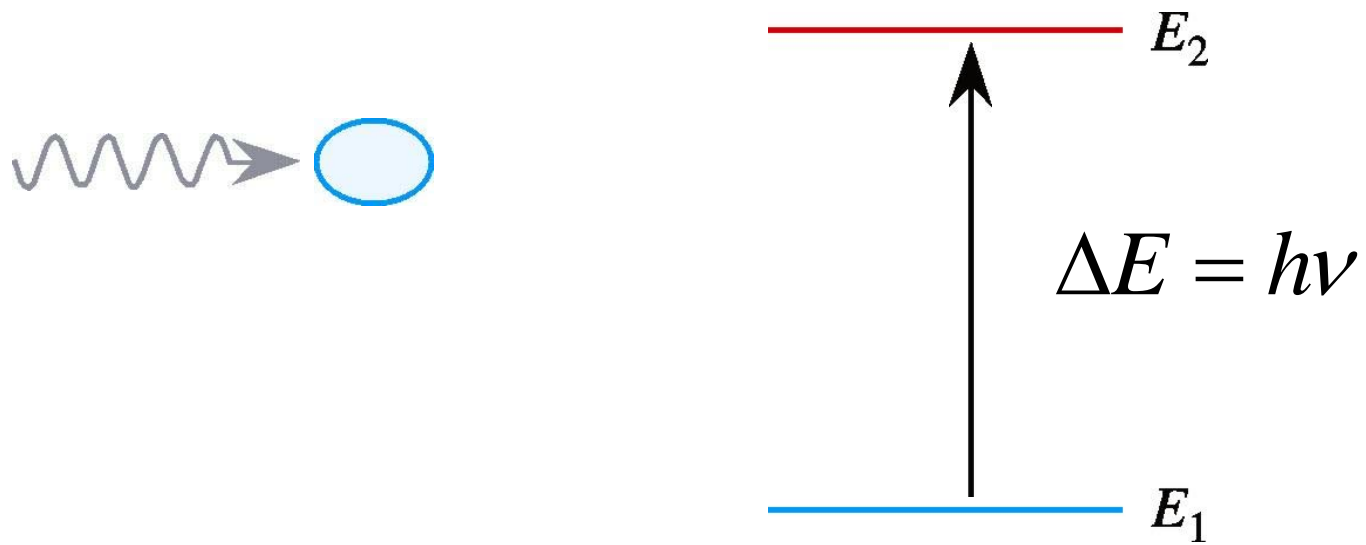
Snaga EMZ $\Phi = \frac{dQ}{dt}$ **odaslana energija/vrijeme**

Egzitancija izvora $M = \frac{d\Phi}{dA_{\text{izvor}}}$ **snaga/ploština**

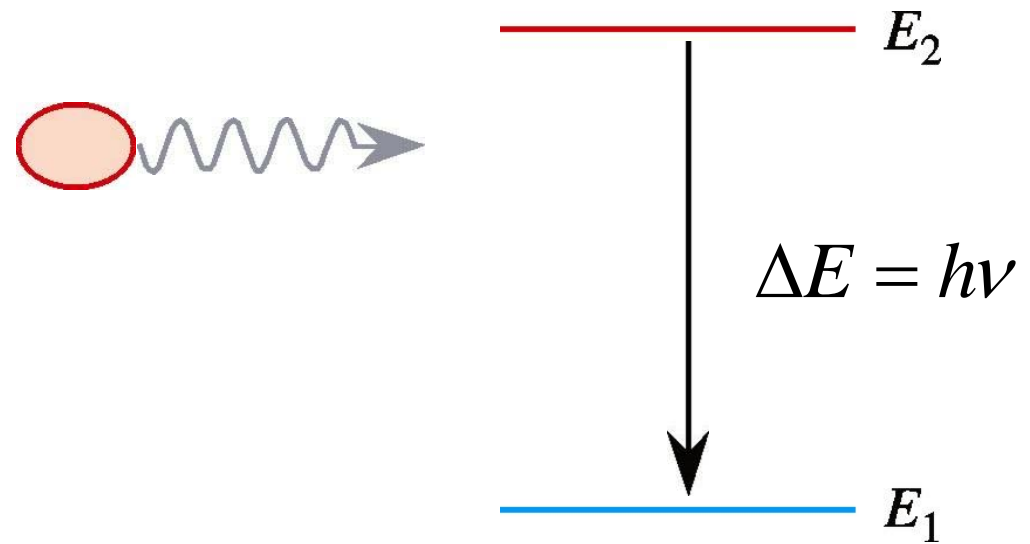
Intenzitet izvora $I = \frac{d\Phi}{d\Omega}$ **snaga/prostorni kut**

Ozračenost tijela, iradijancija, intenzitet, gustoća, fluks zračenja $E = \frac{d\Phi}{dA_{\text{uzorak}}}$ **snaga/ploština**

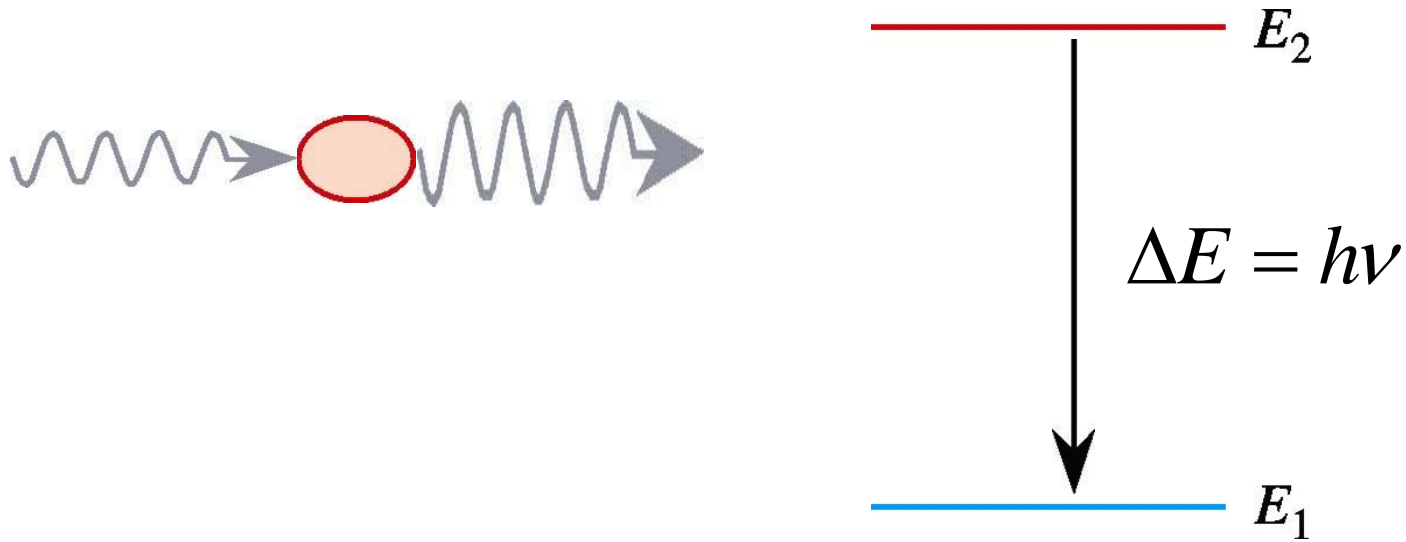
Apsorpcija



Spontana emisija



Inducirana (stimulirana) emisija



Interakcija EMZ s materijom

- odbijanje, **refleksija**
- prolaz kroz tijelo, **transmisija**
- upijanje, **apsorbacija**

$$I_0 = I_{\text{refl}} + I_{\text{aps}} + I_{\text{trans}}$$

$$1 = \frac{I_{\text{refl}}}{I_0} + \frac{I_{\text{aps}}}{I_0} + \frac{I_{\text{trans}}}{I_0}$$

$$1 = \rho + \alpha + \tau$$

reflektancija

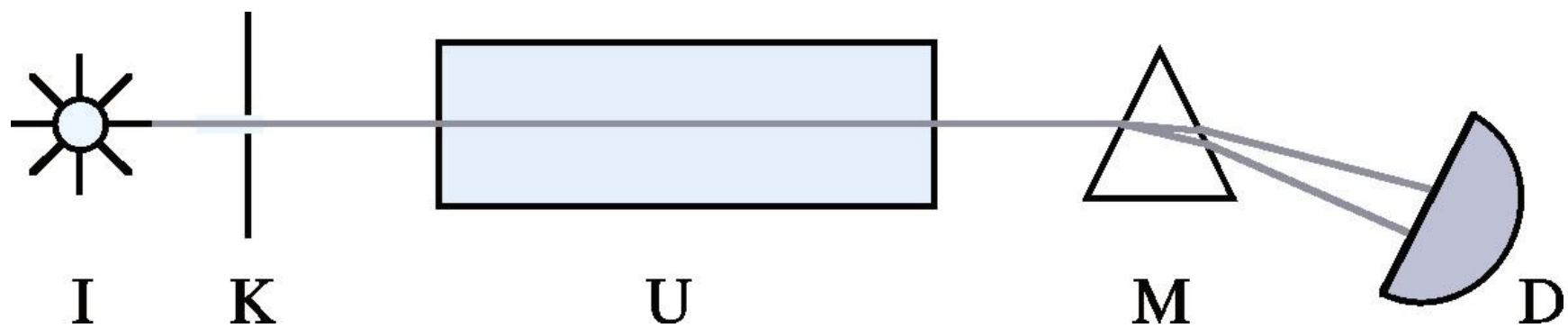
apsorptancija

transmitancija

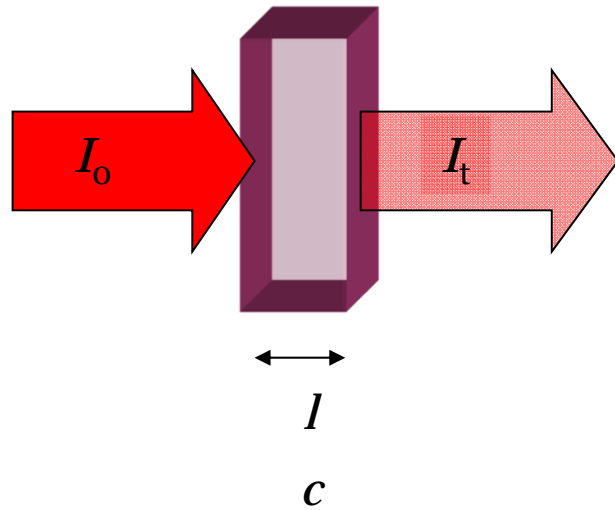
Apsorbancija

$$A = \log \frac{I_0}{I_t} = -\log \tau$$

Uređaj za ispitivanje apsorpcije EMZ



Lambert-Beerov zakon



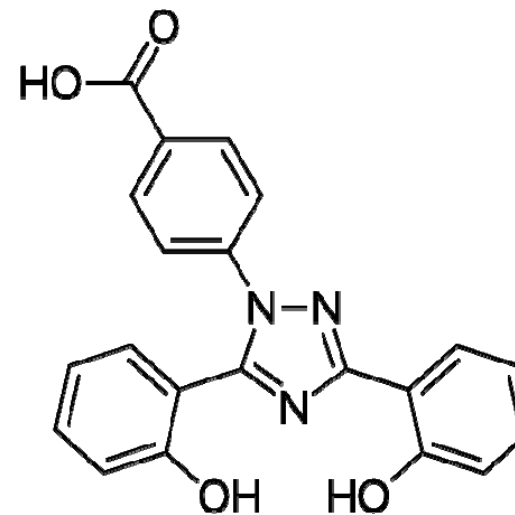
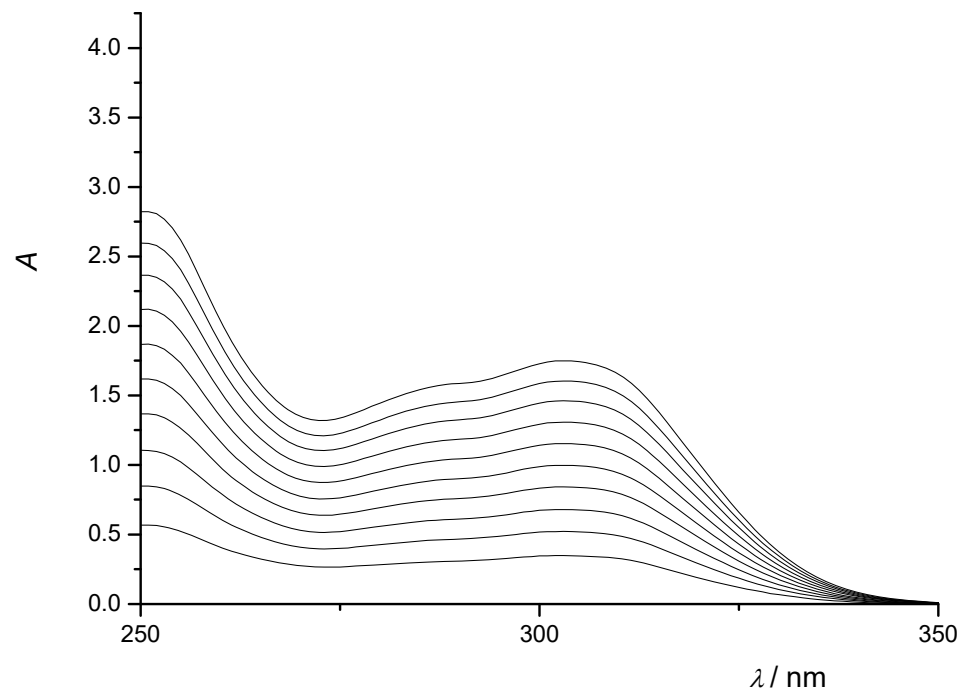
$$-\frac{dI}{dx} = \kappa c I$$

$$I_t = I_0 \exp[-\kappa c l]$$

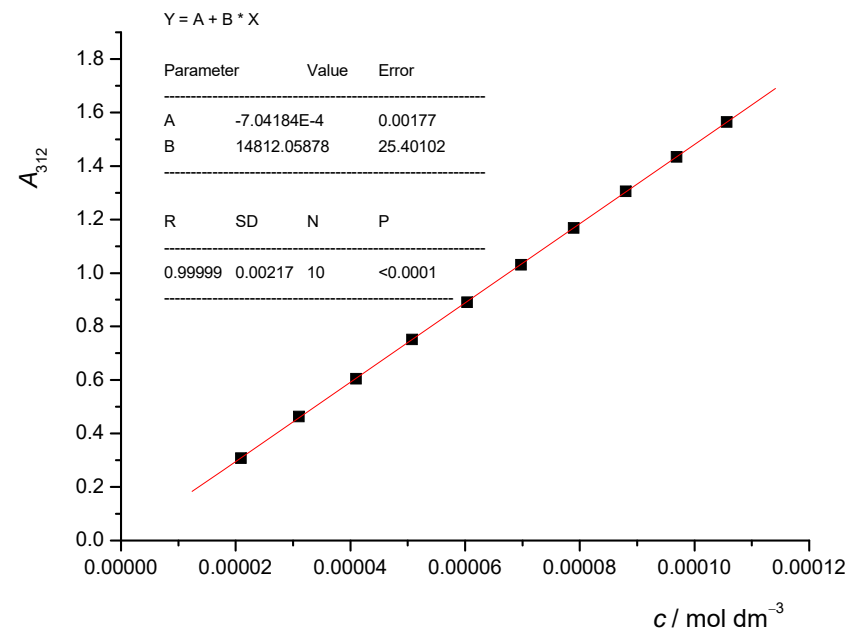
$$I_t = I_0 10^{[-\epsilon c l]}$$

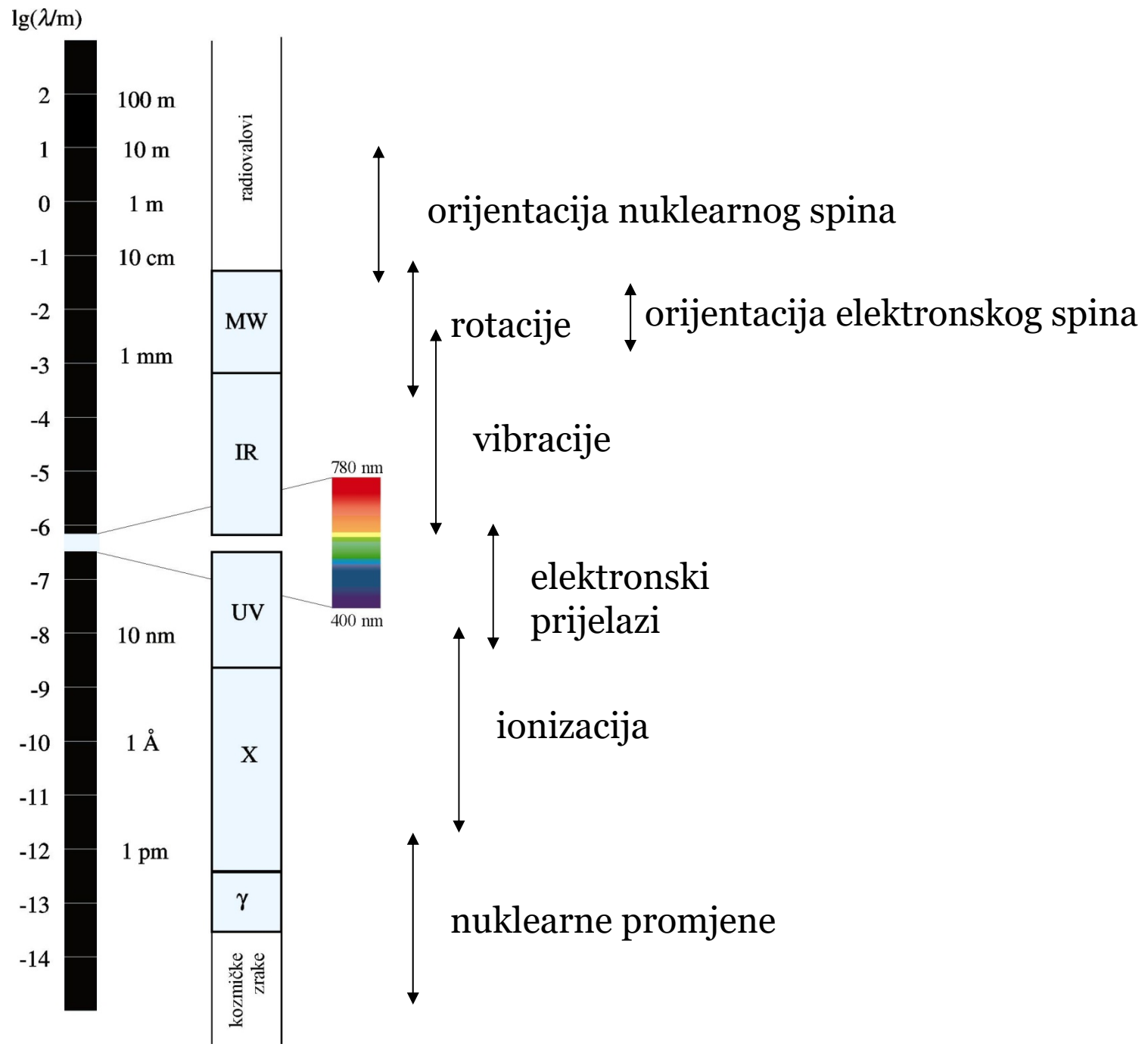
$$A = \epsilon c l$$

$$A = \log \frac{I_0}{I}$$



$$A = \epsilon cl$$

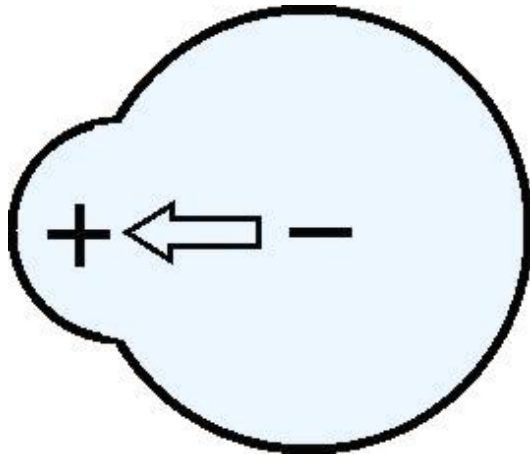




Interakcija EMZ i molekula

- interakcija električnog polja zračenja i električnog dipolnog momenta
- interakcija zračenja i magnetskog dipolnog momenta
- interakcija zračenja i električnog kvadrupolnog momenta

Električni dipolni moment



HCl

$$\vec{p} = \sum_i Q_i \vec{r}_i$$

Električni dipolni moment

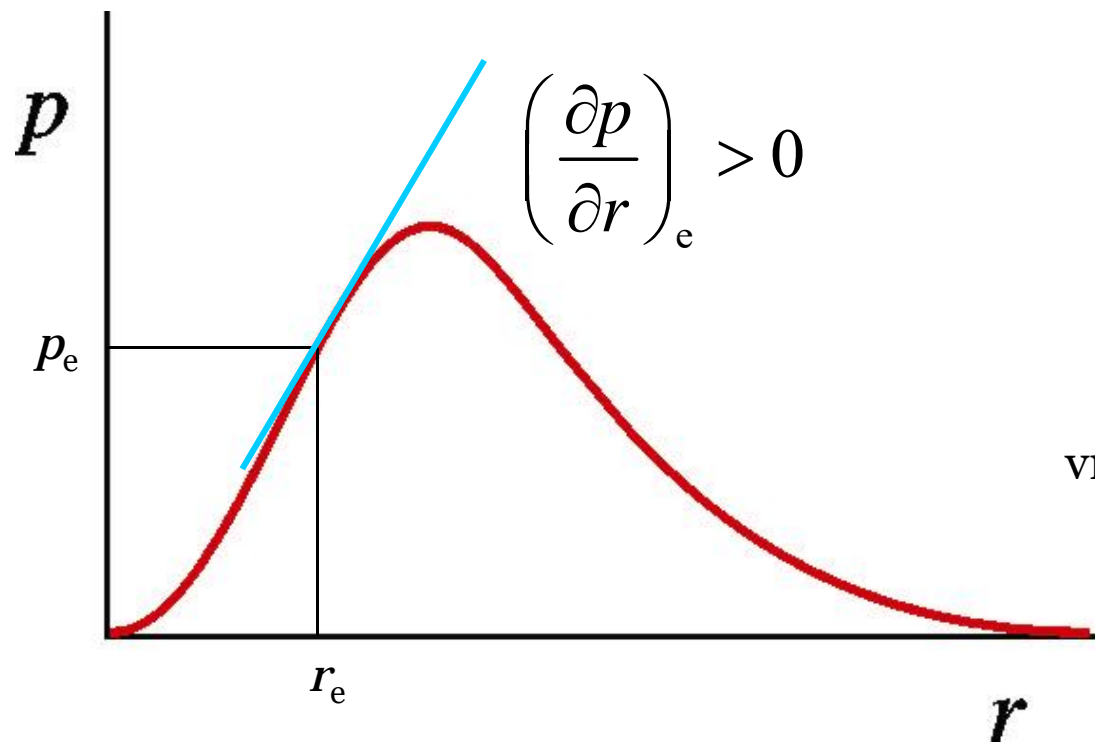
je vektor iznosa

$$p = Qr$$

usmjeren od

težišta negativnog prema

težištu pozitivnog naboja



Električni dipolni moment heteronuklearne dvoatomne molekule ovisi o internuklearnoj udaljenosti a pri ekstremnim vrijednostima ($r = 0$ i $r = \infty$) jednak je nuli.

Herzov oscilator – klasični model izvora EMZ

EMZ se odašilje u prostor jednakom frekvencijom kojom titraju električni dipoli, (sustav nabijenih čestica) a intenzitet zračenja ovisi o promjeni dipolnog momenta.

- prijelazni moment R_{12}

$$R_{12} = \int_{\tau} \psi_2 \hat{p} \psi_1 \mathbf{d}\tau$$

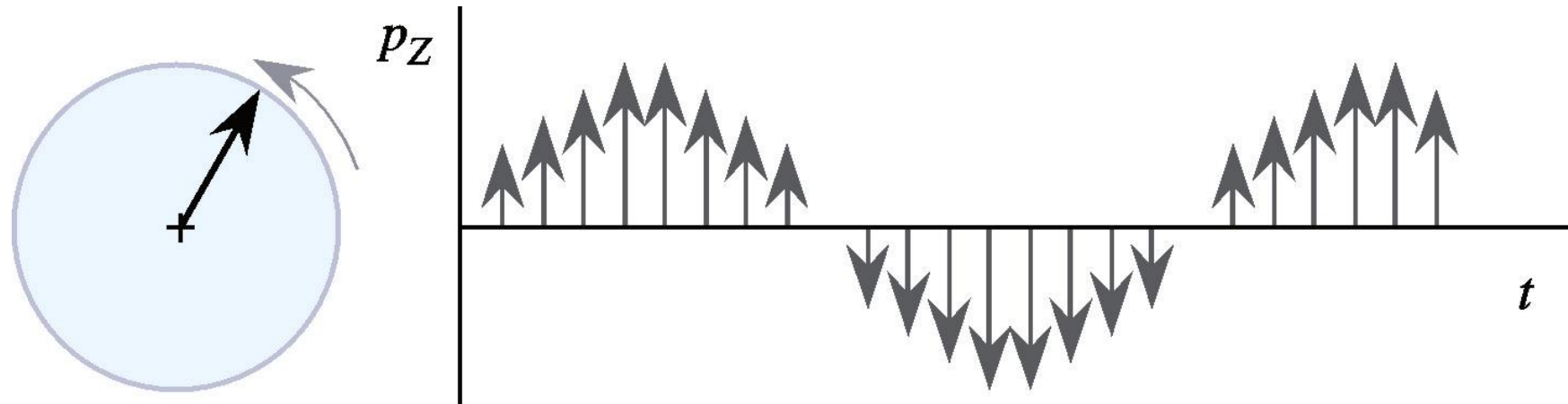
ψ_2, ψ_1 - rješenja vremenski ovisne Schrödingerove jednačbe

IZBORNA PRAVILA

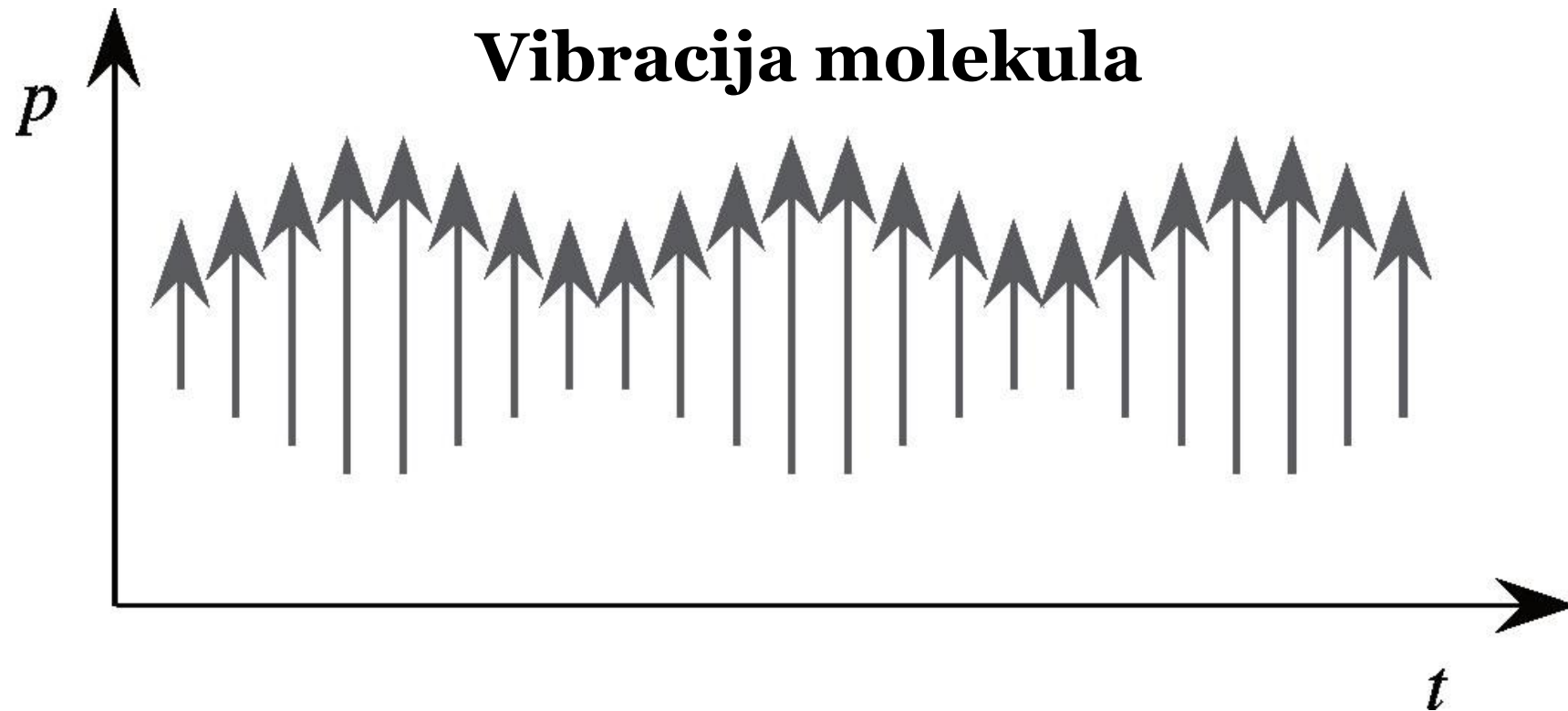
zabranjeni prijelaz $1 \rightarrow 2$ $R_{12} = 0$

dozvoljeni prijelaz $1 \rightarrow 2$ $R_{12} \neq 0$

Rotacija molekula



- Molekule koje imaju stalni dipolni moment
- dolazi do interakcije s EMZ koja dovodi do apsorpcije ili emisije
 - rotacijski spektri

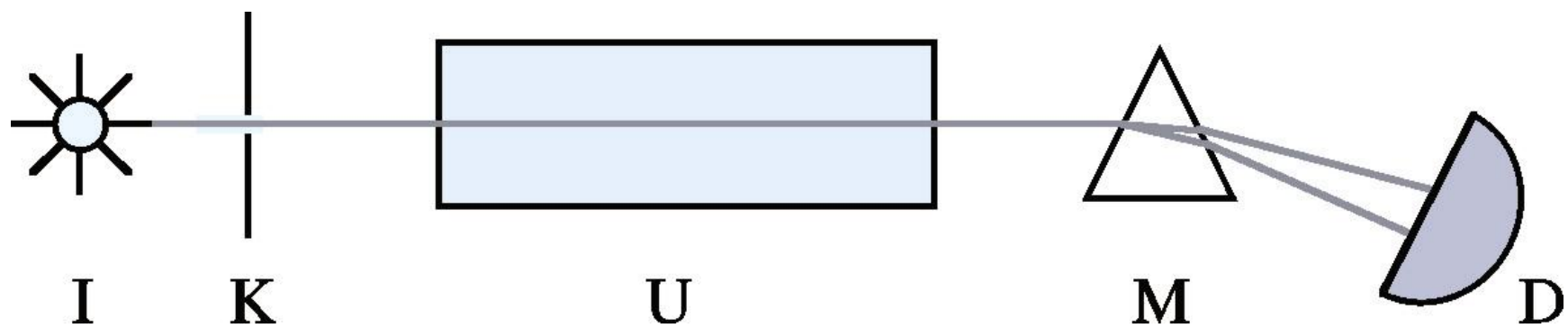


- vibracija (gibanje jezgara u molekuli) uzrokuje promjenu internulkearne udaljenosti i dipolnog momenta
- dolazi do interakcije s EMZ koja dovodi do apsorpcije ili emisije
- vibracijski spektri

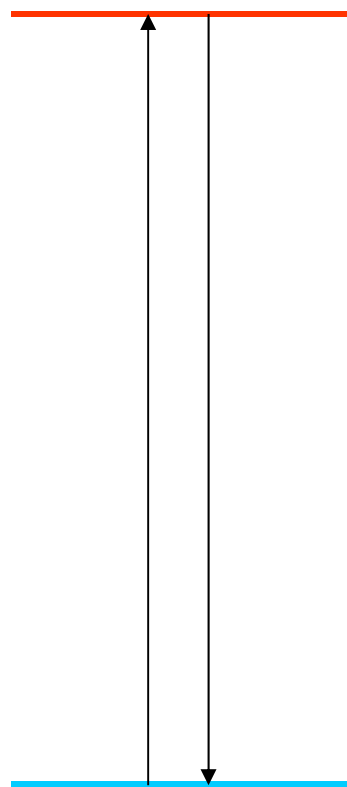
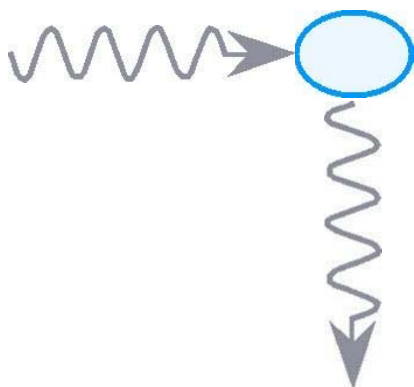
Elektronski spektri

- vjerojatnost prijelaza iz jednog elektronskog stacionarnog stanja u drugo
- prijelazni moment $R_{12} \neq 0$

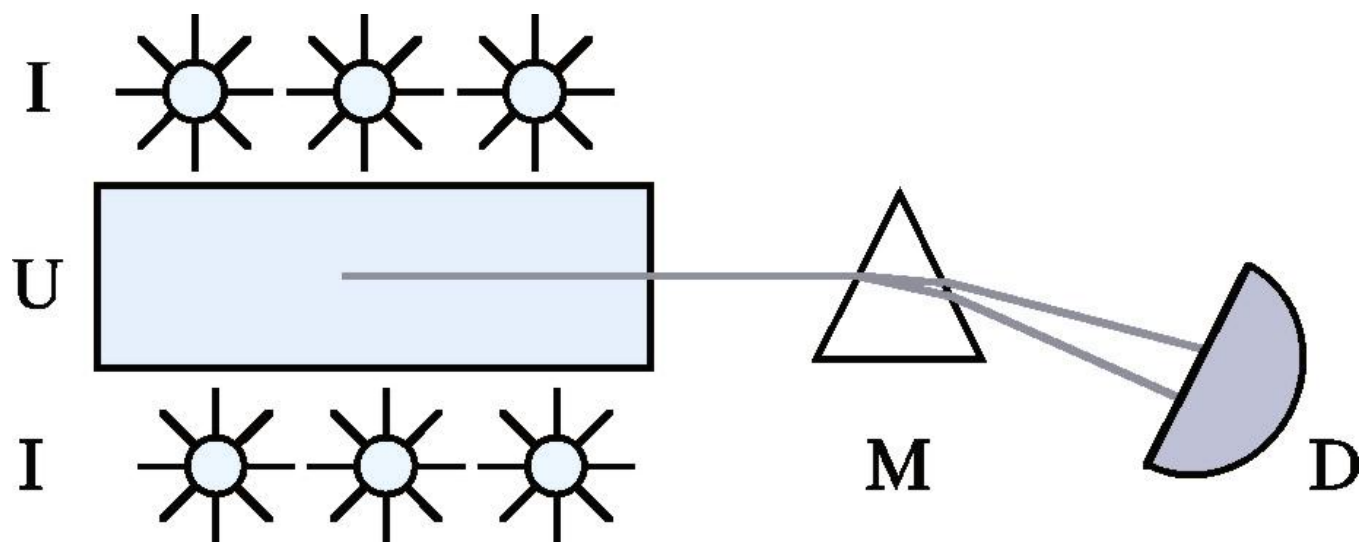
Uređaj za ispitivanje apsorpcije EMZ



Raspršenje



Uređaj za ispitivanje raspršenja EMZ



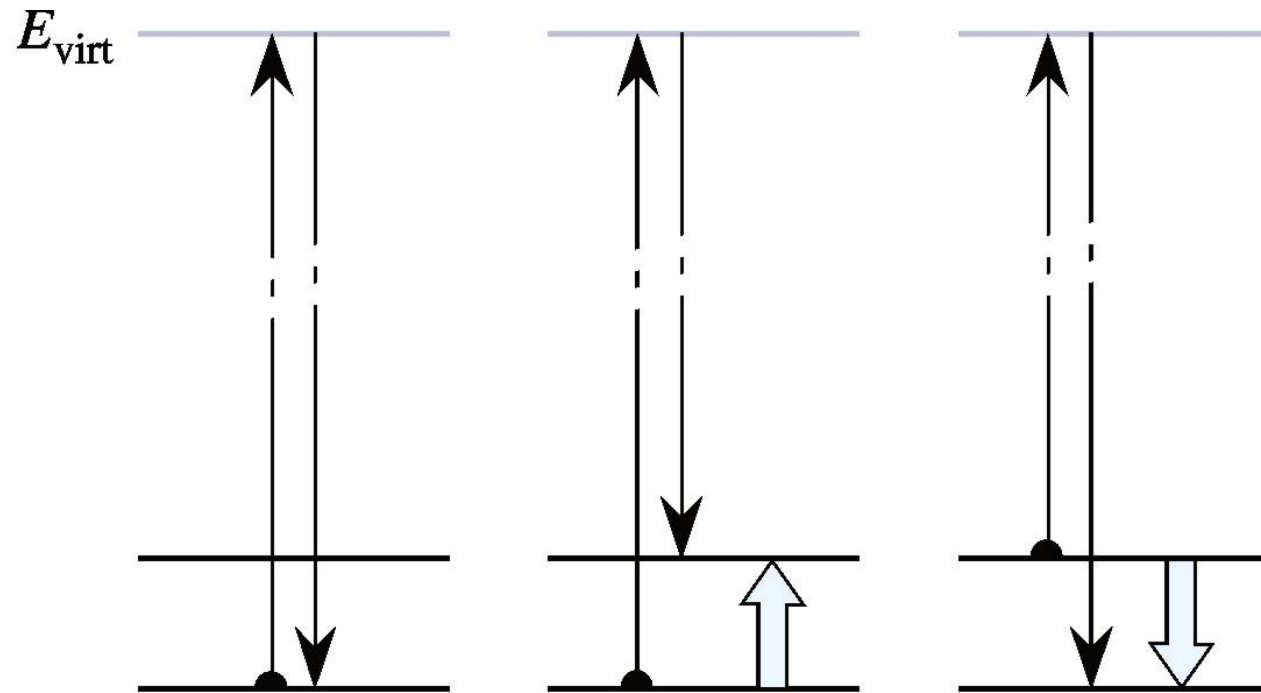
RASPRŠENJE ZRAČENJA NA MOLEKULAMA

Rayleigh

Raman

Stokes

anti-Stokes



molekula: $E_{\text{kon}} = E_{\text{poč}}$

$E_{\text{kon}} > E_{\text{poč}}$

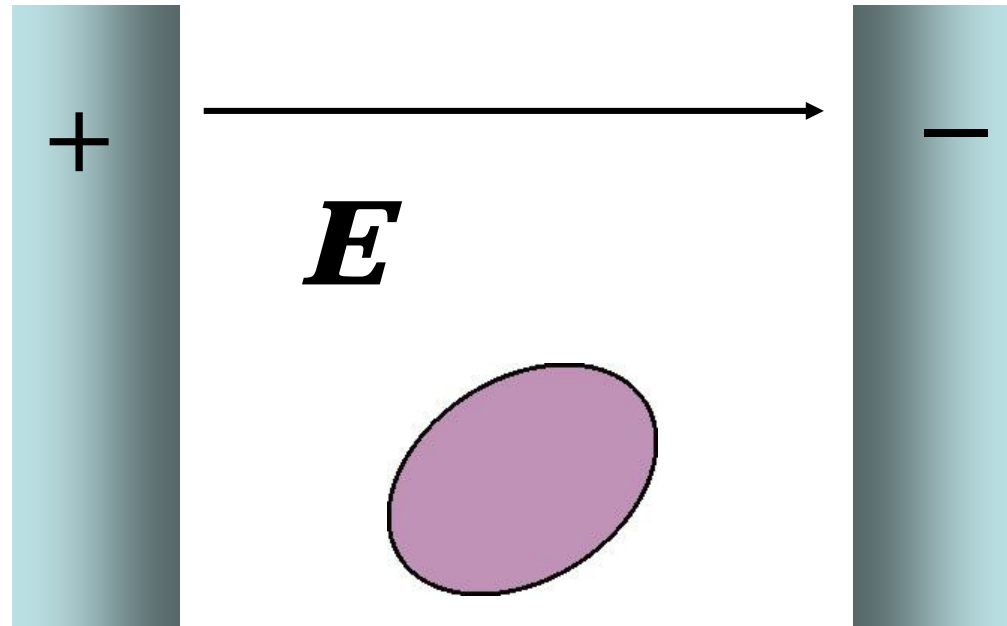
$E_{\text{kon}} < E_{\text{poč}}$

foton: $\nu_r = \nu_0$

$\nu_r < \nu_0$

$\nu_r > \nu_0$

Polarizabilnost



$$p_i = \alpha E$$

$$P_{12} = \int_{\tau} \psi_2 \hat{\alpha} \psi_1 \mathbf{d}\tau$$

-rotacijski Ramanovi spektri (H_2 , CO_2 , C_6H_6 , ..)

Energije molekula

Molekula s N atoma

- $3N$ koordinata

NELINEARNE MOLEKULE

$3N$ načina gibanja

3 koordinate za translaciju

3 koordinate za rotaciju

$3N-6$ koordinate za vibracije

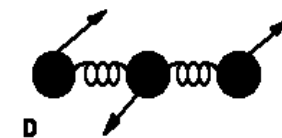
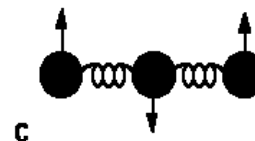
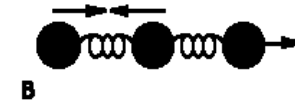
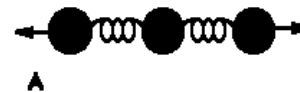
LINEARNE MOLEKULE

$3N$ načina gibanja

3 koordinate za translaciju

2 koordinate za rotaciju

$3N-5$ koordinate za vibracije



Pitanja za ponavljanje

1. Što je elektromagnetsko zračenje?
2. Što je valni broj?
3. Nabrojite područja elektromagnetskog zračenja.
4. Koje se promjene zbivaju kod molekula u tim područjima energije?
5. Kako glasi Lambert-Beerov zakon?
6. Što je apsorpcija, spontana i inducirana emisija?
7. Koji je smjer dipolnog momenta?
8. Kako se mijenja dipolni moment s internuklearnom udaljenošću heteronuklearne dvoatomne molekule?
9. Zašto homonuklearne dvoatomne molekule ne apsorbiraju infracrveno zračenje?
10. Koje molekule nemaju apsorpcijske rotacijske spektre?
11. Koji je najčešći tip interakcije zračenja i molekula?
12. Što su izborna pravila?
13. Kako zapažamo raspršenje zračenja?
14. Objasnite Rayleighovo i Ramanovo raspršenje kvalitativnim opisom zračenja.
15. Koji uvjet mora biti zadovoljen da dođe do Ramanova raspršenja?
16. Što je polarizabilnost molekule?