

SEMINAR 13.6.2014.

1. 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.

(R: $\omega = 2252 \text{ cm}^{-1}$, $k = 2050 \text{ N m}^{-1}$, $E_{0,m} = 13,6 \text{ kJ mol}^{-1}$)

2. 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?

(R: $\tilde{G}(1) - \tilde{G}(0) = 2558 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{G}(2) - \tilde{G}(0) = 5026 \text{ cm}^{-1}$)

3. Valni broj koji odgovara vibracijskim energijama nivoa molekule klora dan je s $\tilde{G}(v)/\text{cm}^{-1} = 564,9 \left(v + \frac{1}{2} \right) - 4,0 \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$ gdje je v vibracijski kvantni broj. Izračunajte energiju nulte točke i klasičnu energiju disocijacije te molekule.

(R: $E_0 = 5,59 \cdot 10^{-21} \text{ J}$, $E_d = 3,96 \cdot 10^{-19} \text{ J}$)

4. 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?

(R: $\tilde{G}(1) - \tilde{G}(0) = 2885,6 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{G}(2) - \tilde{G}(1) = 2781,6 \text{ cm}^{-1}$, $v_{\max} = 28$)

5. 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!

(R: $J = 10 \leftarrow J = 9$, $J = 11 \leftarrow J = 10$, $J = 12 \leftarrow J = 11$, $J = 13 \leftarrow J = 12$, $J = 14 \leftarrow J = 13$)