

Лабораторна робота 1

Дослідження обертальної структури коливального спектру молекули CO_2 за фоновим ІЧ-спектром атмосферного повітря

1. Мета роботи

Дослідити обертальну структуру смуги антисиметричного валентного коливання молекули CO_2 та, використовуючи експериментальні дані, визначити обертальну сталу B і довжину зв'язку $\text{C}=\text{O}$.

2. Теоретичні відомості

Молекула CO_2 має 4 нормальні коливання: валентне повносиметричне, двічі вироджене деформаційне коливання, та валентне антисиметричне. Валентне повносиметричне коливання неактивно у спектрах ІЧ поглинання через відсутність у молекули дипольного моменту. Деформаційні коливання активні у спектрі при 667 см^{-1} , а валентне антисиметричне – при 2350 см^{-1} (Рис. 1)

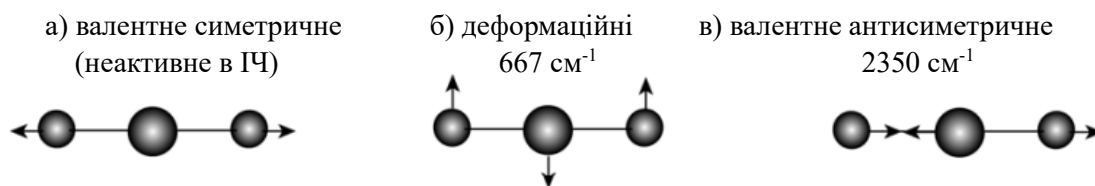


Рис. 1. Нормальні моди коливань молекули CO_2 .

Фур'є-спектрофотометри інфрачервоної області (FTIR) мають достатню роздільну здатність (1 см^{-1}) для дослідження обертальної структури смуг поглинання деяких багатоатомних молекул. Так, при записі фонового спектру асиметричне валентне коливання CO_2 у районі 2350 см^{-1} виявляє чітку

обертальну структуру, яку можна використати для визначення параметрів цієї молекули.

Енергетичні рівні молекули CO₂ можуть бути записані як

$$E(v_1, v_2, \dots, J) = \underbrace{\sum_i \omega_i \left(v_i + \frac{d_i}{2} \right)}_{\text{коливання НО}} + \underbrace{\sum_i \sum_{j>i} \omega_i \left(v_i + \frac{d_i}{2} \right) \left(v_j + \frac{d_j}{2} \right)}_{\text{ангармонічний доданок}} + \underbrace{B_{[v]} J(J+1)}_{\text{ж.ротатор}} - \underbrace{D_{[v]} J^2(J+1)^2}_{\text{відцентровий розтяг}} \quad (1)$$

Де ω_i - частоти нормальних коливань молекули, v_i , d_i - квантові числа і виродження і-го нормального коливання, χ_{ij} - константи ангармонізму, $B_{[v]}$ - оберտальна стала для v-го коливального рівня, $D_{[v]}$ - константа відцентрового спотворення для v-го коливального рівня.

Дозволені коливальні переходи відповідають зміні коливального квантового числа на одиницю:

$$\Delta v_i = 1$$

Тому, для енергій дозволених переходів для антисиметричного валентного коливання, виражених у см⁻¹ справедливо

$$\tilde{\nu}_3 = \omega_3 + 2\chi_{33} + \frac{1}{3}\chi_{13} + \chi_{23}$$

Зв'язок між обертальною сталою в моделі жорсткого ротатора B_e і обертальною сталою у збудженому коливальному рівні $B_{[v]}$, має вигляд

$$B_{[v]} = B_{v_1, v_2, v_3} = B_e - \sum_i \alpha_i \left(v_i + \frac{d_i}{2} \right) \quad (2)$$

Де α_i - константи, що відповідають за вклад коливально-обертальної взаємодії для кожної з мод коливань. Для найнижчого коливального стану (тобто $v_1 = v_2 = v_3 = 0$) $B_{[0]} \equiv B_{[000]}$. Ми будемо обчислювати цю константу, яку потім зможемо використовувати для визначення рівноважної довжини зв'язку C=O.

Розраховані таким чином значення обертальної сталої можна використати для знаходження моменту інерції I молекули CO_2 , а також для довжин зв'язків $\text{C}=\text{O}$ r .

$$B_{[0]} = \frac{h}{8\pi^2 I_{[0]} c} \quad (3)$$

Вважаючи атоми точковими масами, з О на відстані r від С, і припускаючи, що обертання відбувається навколо центру мас молекули, вираз для моменту інерції молекули CO_2 наступний:

$$I = \sum m_i r_i^2 = m_{\text{окисген}} r^2 + m_{\text{окисген}} r^2 + m_{\text{карбон}} (0)^2$$

Або

$$I_{[0]} = 2m_{\text{окисген}} r^2 \quad (4)$$

Оскільки досліджується смуга при 2350 см^{-1} нас цікавить значення сталої $B_{[001]}$, (збуджуватися буде тільки асиметрична мода, а дві інші залишаються в основному стані $[001]$). Відцентрові спотворення, $D_{[i]}$, досить малі для багатоатомних лінійних систем і тому будуть апроксимовані D_e . Тоді вираз для $B_{[001]}$ можемо записати як

$$B_{001} = B_e - \sum_i \alpha_i \left(v_i + \frac{d_i}{2} \right) - \alpha_3 = B_{[0]} - \alpha_3 \quad (5)$$

Згадуючи, що для дозволених обертальних переходів $\Delta J = \pm 1$, отримуємо для енергій дозволених переходів, виражених у см^{-1} :

R-гілка, $\Delta J = +1$ ($J \rightarrow J+1$) :

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_3 + B_{[001]} (J+1)(J+2) - B_{[0]} J(J+1) - D_e \left((J+1)(J+2) - J^2(J+1)^2 \right);$$

Спрощуючи, отримуємо:

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_3 + 2B_{[0]} (J+1) + \alpha_3 (J+1)(J+2) - 4D_e (J+1)^3 \quad (6)$$

Р- гілка, $\Delta J = -1$ ($J \rightarrow J-1$) :

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_3 + B_{[001]}(J-1)J - B_{[01]}(J)(J+1) - D_e \left((J-1)^2 J^2 - J^2 (J+1)^2 \right)$$

Спростуючи, отримуємо:

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_3 + 2B_{[01]}(-J) + \alpha_3(J-1)(J) - 4D_e(-J)^3 \quad (7)$$

Рівняння (6) і (7) можна об'єднати у єдине рівняння з параметром m . Цей параметр приймає має значення $m = J + 1$ для R-гілки і $m = -J$ для Р-гілки.

$$\nu(m) = \nu_3 + B_{[01]}2m + \alpha_3(-m - m^2) + D_e(-4m^3) \quad (8)$$

Для CO_2 основний стан симетричний по відношенню до двох атомів кисню. Тому хвильові функції ψ_{el} ψ_{vib} симетричні в своїх основних станах і тільки переходи з парних обертальних станів ($J = 0, 2, 4, \dots$) призводять до поглинання ІЧ фотонів. Це означає, що половина ліній обертання, які спостерігалися б для інших лінійних молекул (наприклад, HCl) для CO_2 не спостерігаються.

Таким чином, у спектрі ви побачите лише наступні переходи. (Для зручності деякі з переходів позначені на Рисунку 2).

R-гілка	P-гілка
$\Delta J = +1$ ($m = J + 1$)	$\Delta J = -1$ ($m = -J$)
$0 \rightarrow 1$ ($m = 1$)	$2 \rightarrow 1$ ($m = -2$)
$2 \rightarrow 3$ ($m = 3$)	$4 \rightarrow 3$ ($m = -4$)
$4 \rightarrow 5$ ($m = 5$)	$6 \rightarrow 5$ ($m = -6$)
...	...

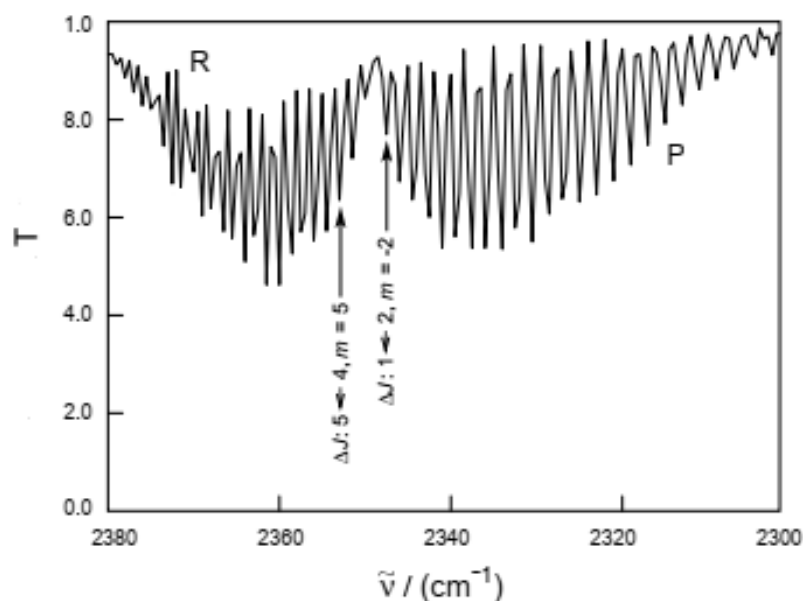


Рис 2. Обертальна структура смуги 2350 cm^{-1} молекули CO_2

3. Установка, програмне забезпечення

Для запису спектру поглинання атмосферного CO_2 використовується Фур'є спектрометр з приставкою для порушеного повного внутрішнього відбиття (наприклад, Shimadzu IRTTracer-100).

Фур'є спектрометр складається з наступних частин (рис 3). Джерелом (1) випромінювання слугує стабільне ІЧ-джерело (наприклад, глобар) яке випромінює широкий спектр інфрачервоного світла. ІЧ випромінювання проходить через інтерферометр Майкельсона, де розділяється на два пучки напівпрозорим дзеркалом (2). Один пучок відбивається від стаціонарного дзеркала (3), інший — від рухомого (4). Обидва пучки інтерферують, створюючи інтерферограму — сигнал у часовій області, який містить інформацію про всі частоти спектру одночасно. Інтерферограма проходить через зразок (5), який поглинає певні довжини хвиль залежно від наявних хімічних зв'язків та молекулярної структури. Після проходження через зразок сигнал реєструється чутливим детектором (6). Отримана інтерферограма обробляється за допомогою швидкого перетворення Фур'є (FFT), для отримання ІЧ-спектру — графіку залежності поглинання або пропускання як функції довжини хвилі або

хвильового числа. Автоматичне калібрування спектрометра виконується за допомогою допоміжного лазера (7) і детектора (8).

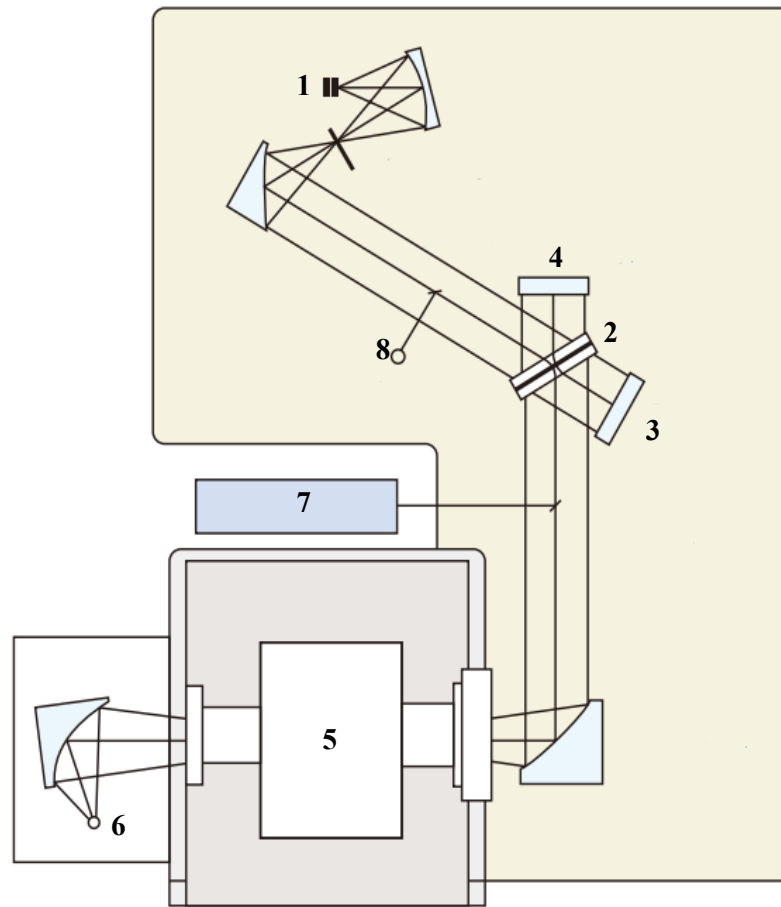


Рис. 3 Схематичне зображення Фур'є-спектрометра.

Зазвичай перед проведенням вимірювань необхідно записати фоновий спектр (background spectrum) оточуючої атмосфери. У повітрі в лабораторії, як відомо, крім азоту, кисню, та водяної пари, міститься також 0.04% вуглекислого газу.

У програмі Lab Solutions IR, що постачається з Shimadzu IRTracer-100, вимірювання фонового спектру виконується натисканням кнопки BKG Scan (відмічена червоним кружечком на Рис. 4) Вибір представлення спектру (пропускання = transmission чи поглинання = absorbance), роздільної здатності (resolution), діапазону вимірювань (range), та кількості записаних спектрів для усереднення (no. of scans) виконується в окремому меню (відмічене фіолетовим кружечком на Рис. 4) Записаний файл зі спектром (відмічений жовтим

кружечком на Рис. 4) можна зберегти у форматі .txt, викликавши відповідне спливаюче меню правою кнопкою миші.

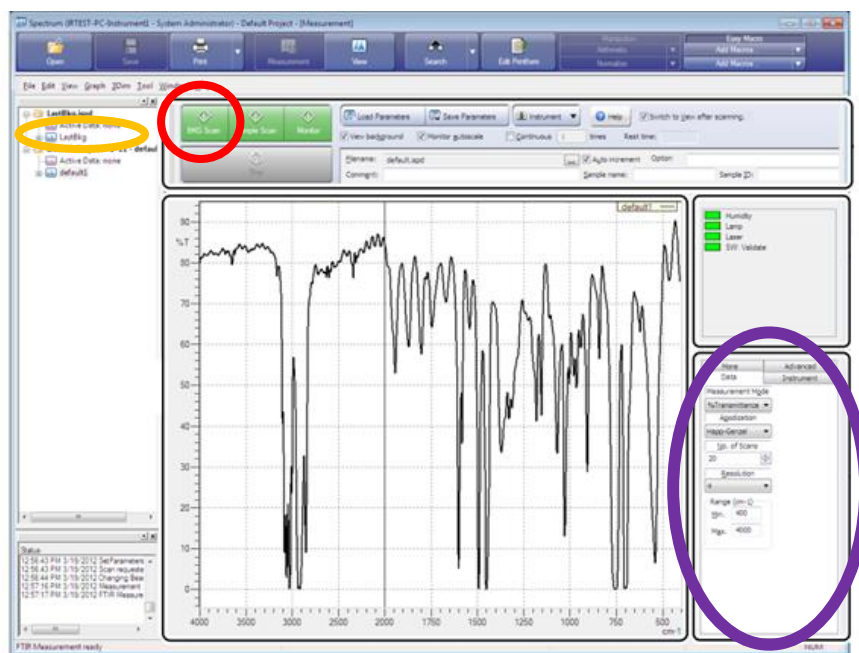


Рис. 4 Інтерфейс програми Lab Solutions IR.

4. Експериментальні завдання

- 1) Ознайомтеся з будовою і принципом роботи використовуваного FTIR спектрометра.
- 2) Запишіть у діапазоні $3000 - 2000 \text{ cm}^{-1}$ фоновий спектр для оточуючого атмосферного повітря з роздільною здатністю не менше 1 cm^{-1} , кількість сканів 30.
- 3) За отриманим спектром, визначить положення кожної з ліній у R- та P-гілках, приписавши їм відповідне значення m ($m = J + 1$ для R-гілки і $m = -J$ для P-гілки).
- 4) Побудуйте графік залежності $\tilde{\nu}(m)$. Апроксимуйте залежність поліномом третьої степені.
- 5) За графіком з (8) визначте експериментальні значення констант $\tilde{\nu}_3$, $B_{[0]}$, α_3 .
- 6) З (3) і (4) обрахуйте значення I , r .

7) Оцініть похибки експерименту.

8) Порівняйте отримані значення з літературними даними.

5. Контрольні запитання

1. Що таке оберտальна стала молекули? З якою метою її обраховують?
2. Як відрізняються вирази для обертальної сталої виражені в одиницях CI і у см^{-1} ?
3. Чому обертальні переходи в спектрі CO_2 проявляються лише для парних значень J ?
4. Яку інформацію несе в собі параметр α_z , і як його можна інтерпретувати фізично?
5. Як впливає нехтування відцентровим спотворенням на точність визначення довжини зв'язку?
6. Чим відрізняється обертальна структура коливального спектру багатоатомної молекули від двоухатомної молекули?
7. Чи можна використати дані інших мод коливань CO_2 (наприклад, деформаційного) для покращення оцінки параметрів молекули? Як?

6. Використана література

1. Shimadzu Corporation. *Fourier Transform Infrared Spectrophotometer IRTracer-100*. Brochure,
https://www.shimadzu.com/an/sites/shimadzu.com.an/files/pim/pim_document_file/brochures/10378/c103-e091.pdf.
2. Department of Chemistry, University of North Texas. *LabSolutions IR 2.13 Instruction Manual*.
https://chemistry.unt.edu/system/files/labsolutions_ir_2_13_instruction_manual.pdf.
3. Ogren, Paul J. "Using the Asymmetric Stretch Band of Atmospheric CO_2 to Obtain the C=O Bond Length." *Journal of Chemical Education*, vol. 79, no. 1, Jan. 2002

4. Hollas, J. Michael. *Modern Spectroscopy*. 4th ed., Wiley, 2004.

Лабораторна робота 4

**Коливальна структура електронного спектру водного розчину KMnO_4 .
Форми нормальних коливань аніону $(\text{MnO}_4)^-$.**

1. Мета роботи

Дослідити коливальну структуру смуги електронного спектру поглинання водного розчину перманганату калію. Виконати теоретико-груповий аналіз форм коливань аніону $(\text{MnO}_4)^-$.

2. Теоретичні відомості

2.1. Теоретико-груповий підхід визначення форм коливань молекули

Щоб визначити форми нормальних коливань молекули за допомогою теорії груп, необхідно виконати такі кроки.

Визначити симетрію молекули: по-перше, необхідно з'ясувати, до якої точкової групи симетрії належить молекула. Це можна зробити, наприклад, користуючись визначником, що наведено на Рис. 2.

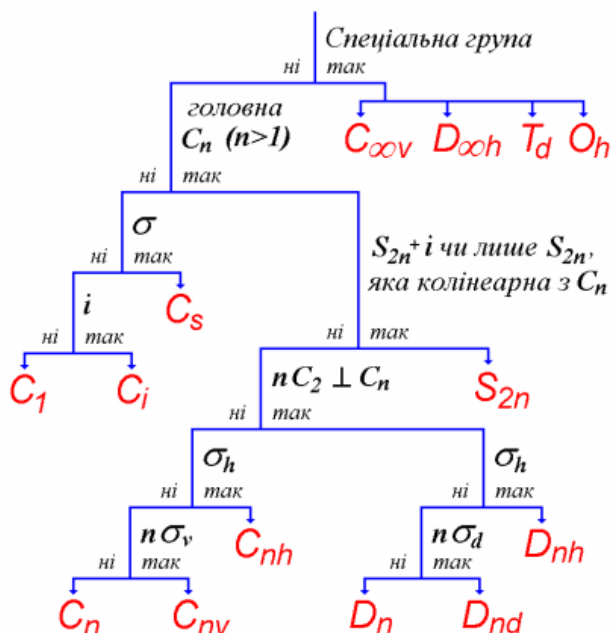
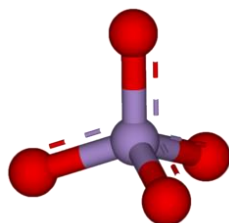


Рис. 1 Аніон (MnO4)⁻.

Рис 2. Визначник групи симетрії молекули.

Відтворено з [4].

Для подальшої роботи необхідно записати таблицю нееквівалентних незвідних представлень для цієї групи симетрії.

Далі потрібно записати характери повного представлення молекули Γ_{3N} , тобто представлення, що описує зміну координат x, y, z кожного з атомів молекули при застосуванні до системи координат кожної з операцій симетрії групи. Цей процес можна розбити на два кроки: Спочатку записати характери звідного представлення Γ_0 , що описує перетворення системи координат при застосуванні операцій симетрії, користуючись таблицею 1.

Таблиця 1. Характери елементів звідного представлення, що відповідає перетворенню системи координат при застосуванні відповідної операції симетрії

Операція симетрії	Характер елементу представлення
E	3
C_n	$1 + 2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right)$

S_n	$-1 + 2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right)$
i	-3
σ	1

Далі, визначити кількість атомів молекули N , що залишаються нерухомими при застосуванні відповідної операції симетрії до молекули.

Тоді характери елементів повного представлення молекули Γ_{3N} , визначаються формулою:

$$\Gamma_{3N} = N\Gamma_0 \quad (1)$$

Розкласти звідне представлення Γ_{3N} на незвідні за формулою:

$$a(\Gamma^\alpha) = \frac{1}{g} \sum_{n=1}^g \chi_n [\chi_n^\alpha]^* \quad (2)$$

Тут a – кількість разів, які незвідне представлення Γ^α міститься у даному звідному представленні, g – порядок групи, χ_n – характер компоненти звідного представлення, χ_n^α – характер компоненти незвідного представлення.

Відняти представлення, що відповідають за трансляцію (представлення, що відповідають базисним функціям x, y, z) та обертання молекули (представлення, що відповідають базисним функціям R_x, R_y, R_z , залишивши лише незвідні представлення, що відповідають нормальним коливанням. Їхня кількість має відповідати $3N - 6$ (або $3N - 5$ для лінійних молекул) ступеням свободи коливального руху.

Для кожного з представлень, що залишилися, визначити форми коливання. Кожному куту і зв'язку у молекулі необхідно присвоїти назву (α_i, s_j). Окремо

для валентних і для деформаційних коливань, скласти вектор Q , кожен з елементів якого показує, як α_i , s_j трансформуються під дією операцій симетрії.

Якщо характери елементів незвідних представлень, що відповідають нормальним коливанням позначити χ , тоді вираз

$$P_{\Gamma}[f] = \frac{1}{g} \sum_Q \chi(Q) \cdot Q[f], \quad (3)$$

де g – порядок групи, а $\chi(Q) \cdot Q[f]$ є поелементним добутком Q та χ , дає можливість уявити, як змінюються довжини зв'язків/кути при нормальних коливаннях молекули.

Наприклад, якщо у виразі s/α мають один знак, ці зв'язки/кути одночасно видовжуються/збільшуються, якщо протилежний – то один видовжується, а інший скорочується. Коефіцієнт перед s/α вказує на відносну амплітуду відповідної деформації зв'язку/кута.

З'ясувати, чи активні ці коливання у спектрах поглинання. Щоб бути активною в спектрі ІЧ поглинання, коливальна мода має викликати зміну дипольного моменту, тобто активними є ті моди, які мають таку саму симетрію, як і дипольний момент (μ). Дипольний момент є вектором з компонентами вздовж напрямків x , y та z . Коливальна структура у електронних спектрах може утворюватися виключно коливаннями, що є повносиметричними.

2.2 Коливальна структура електронного спектру (MnO_4^-)

Молекула KMnO_4 у воді дисоціює на іони K^+ та $(\text{MnO}_4)^-$. УФ-видима спектроскопія зазвичай не дозволяє спостерігати коливальні переходи молекул у розчинах через значне уширення спектральних ліній. Аніон перманганату є цікавим винятком із цього правила (Рис. 3). У цьому виді молекул, за умови акуратного проведення експерименту, можна безпосередньо спостерігати вібронні переходи.

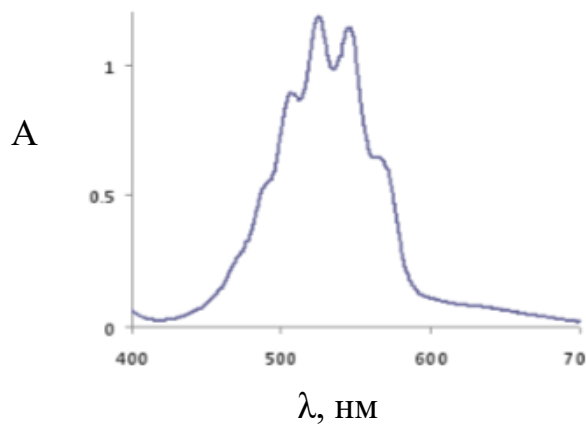


Рис.3 Вібронна структура спектру поглинання водного розчину KMnO_4 .

При переході між двома електронними станами молекули, як правило, одночасно змінюються її коливальна та оберտальна енергії. Повну зміну енергії молекули при такому переході можна записати у вигляді

$$\Delta E = \Delta E_{el} + \Delta E_{vib} + \Delta E_{rot} \quad (4)$$

Кожний електронний перехід між двома електронними станами може характеризуватися певною коливальною структурою, а кожна електронно-коливальна смуга — обертальною структурою (Рис 4). При розгляді коливальної структури електронного переходу будемо нехтувати обертальною структурою смуг, вважаючи, що обертальний стан молекули при електронному переході не змінюється.

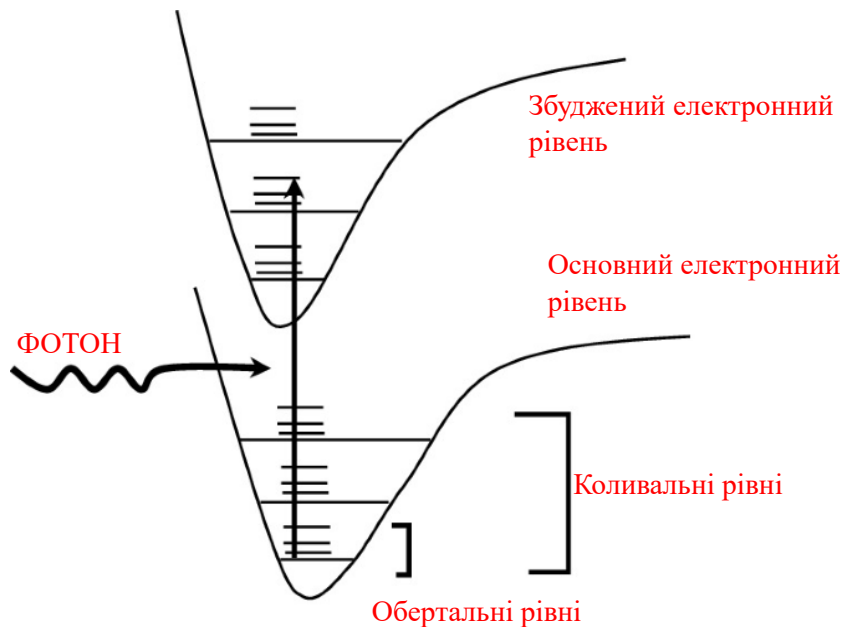


Рис 4. Схематична діаграма переходів, що призводять до появи спектрів поглинання.

Початкова кількість молекул в збуджених станах за кімнатної температури є малою. Тому найбільш інтенсивні переходи, що ми спостерігаємо у видимій області, відносяться до переходів ${}^1A_1 \rightarrow {}^1T_2$ ($1t_1-2e$).

Дозволені переходи між енергетичними рівнями $(MnO_4)^-$ відповідають зміні коливального квантового числа на одиницю, $\Delta v = +1$. Тому положення ліній, присутніх у спектрі, визначається як

$$\tilde{\nu}_{[v]} = \tilde{\nu}_{electr} + \tilde{\nu}_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \tilde{\nu}_e \chi \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (5)$$

Тут $\tilde{\nu}_{electr}$ – хвильове число, що відповідає електронному переходу, v – коливальне квантове число, χ – константа ангармонізму, $\tilde{\nu}_e$ – хвильове число, що відповідає частоті коливань, відповідальній за структуру спектру.

Відповідно, відстань між сусідніми лініями дорівнює:

$$\Delta_1 = G(v+1) - G(v) = \tilde{\nu}_e - 2\tilde{\nu}_e \chi (v+1) \quad (6)$$

Або, нехтуючи доданками, що відповідають ангармонізму коливань:

$$\Delta_1 = \tilde{\nu}_e \quad (7)$$

У класичному гармонічному наближенні повносиметричне коливання кожного з атомів О аніону $(\text{MnO}_4)^-$ можна уявити собі як рух О на «пружинці» жорсткістю k відносно нерухомого масивного нерухомого Мп. Оскільки коливання повносиметричне, можна уявити, що усі чотири О рухаються у фазі, з єдиною частотою ν . Для частоти такого коливання буде справедливий відомий вираз:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}, \quad (8)$$

де M – маса атома ^{16}O . Останній вираз дозволяє також оцінити жорсткість k зв'язку Мп-О.

3. Установка, програмне забезпечення

Для запису спектру поглинання використовується спектрофотометр B&W Tek BTC100-2S. Коротка характеристика його параметрів наведена нижче.

- Спектральний діапазон: 400–640 нм
- Ширина щілини: 50 мкм
- Дифракційна ґратка: 1800 ліній/мм
- Детектор: Sony ILX511, ПЗЗ-матриця на 2048 пікселів
- Інтервал між пікселями: 14 мкм
- Розмір пікселя: 200 мкм
- Оптична схема монохроматора: Черні-Тернер

Оптична схема монохроматора Черні-Тернера у B&W Tek BTC100-2S приведена на Рис. 5. Світло від джерела А, через щілину В, потрапляє на сферичне дзеркало С. Щілина розташована у фокальній площині дзеркала С. Отриманий паралельний пучок світла поширюється далі до дифракційної ґратки D. Детектор F знаходиться у фокальній площині сферичного дзеркала Е.

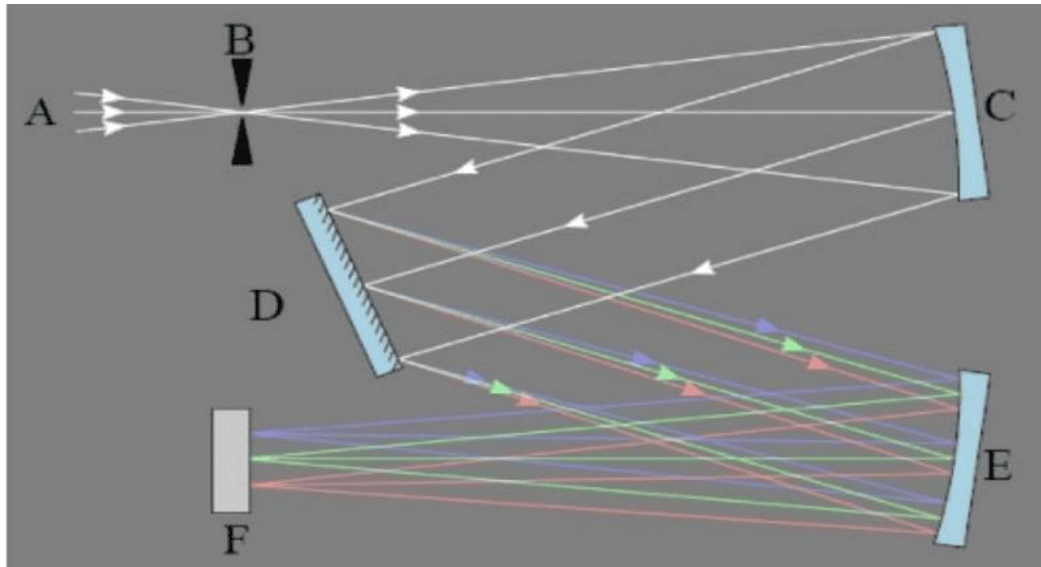


Рис. 5 Монохроматор Черні-Тернера.

Джерело світла (лампа розжарювання чи LED лампа), кювета зі зразком, та спектрометр з'єднуються як показано на Рис. 6.

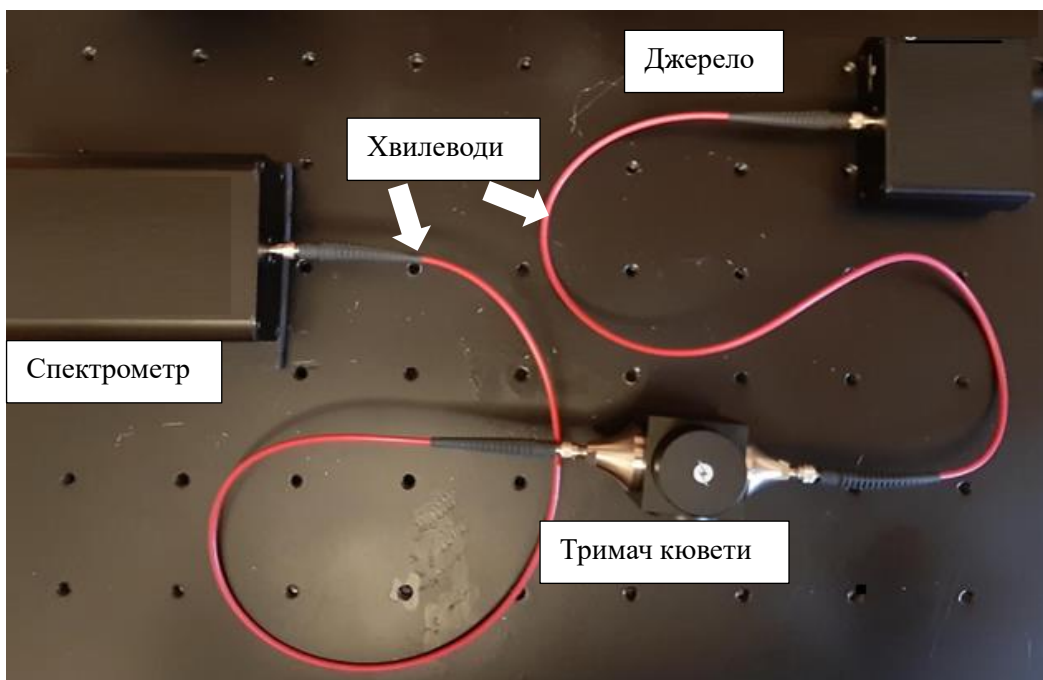





Рис 6. Схема установки

У випадку виконання роботи з використанням спектрометра B&W Tek BTC100-2S спектр записується у програмі Spectrum Studio. Нижче наведено коротке керівництво з роботи з програмою.

Відкривши програму, у меню Spectrometers виберіть Detect Spectrometers.

Градуювання спектрометру відбувається за допомогою ртутної лампи. Запишіть спектр ртутної лампи, натиснувши Scan Continuous. Збережіть спектр (меню File, Save As). У отриманому .csv файлі визначить номери пікселів, які відповідають найяскравішим лініям у спектрі ртуті (492 нм, 546 нм, 577 і 579 нм).

Натиснувши кнопку , у спливаючому меню введіть номери пікселів (Pixel Number) і відповідні довжини хвиль (Wavelength (nm)) для кожної з чотирьох ліній. Натисніть OK.

Запишіть спектр джерела випромінювання. За необхідності змініть час запису спектру (меню Integration Time) або кількість сканів, чиє середнє значення ви запишете (Averages). У меню  виберіть опцію «Use as a background spectrum». Цю процедуру можливо треба буде виконати декілька разів в процесі проведення роботи. Для скидання фонового спектру у меню  виберіть опцію «Delete background».

Вставте у тримач кювету зі зразком, закрийте тримач кришкою, і запишіть отриманий спектр. Збережіть його (меню File, Save As).

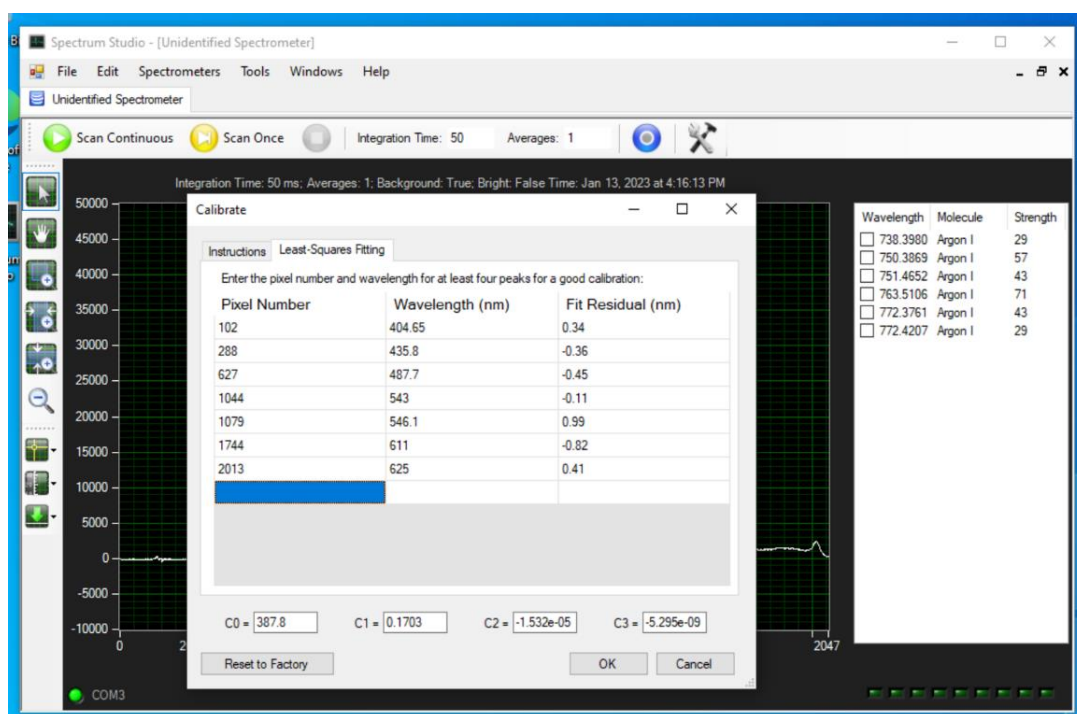


Рис 7. Інтерфейс програми Spectrum Studio.

4. Експериментальні завдання:

- 1) Підготуйте розчин KMnO_4 у дистильованій воді в окремій посудині, розчинивши кристали у воді. Невелику кількість розчину налийте у кювету за допомогою піпетки. Заповніть решту кювети дистильованою водою.
- 2) Запишіть спектр поглинання водного розчину KMnO_4 у діапазоні 400 – 600 нм з роздільною здатністю не менше 5 cm^{-1} . У випадку, якщо коливальна структура не проявляється, зменшить концентрацію досліджуваного розчину, додавши у кювету дистильовану воду.
- 3) Розкладіть спектр на компоненти. Для молекул у рідкому стані або розчині переважає розширення внаслідок зіткнень та близького їх розташування. Оскільки існує багато джерел розширення, лінії мають стабільний розподіл, що прямує до гауссової форми.
- 4) За результатами розкладу спектру на компоненти, визначить положення ліній поглинання у cm^{-1} .
- 5) Обчисліть частоту коливань $(\text{MnO}_4)^-$, що відповідає за отриманий спектр $\tilde{\nu}_e$, за формулою (7).
- 6) Зробіть оцінку порядку величини константи ангармонізму χ за формулою (6).
- 7) Користуючись базою даних NIST Chemistry Web Book, порівняйте отримане значення $\tilde{\nu}_e$ з табличним.
- 8) Обчисліть значення сталої пружності для аніону $(\text{MnO}_4)^-$ за формулою (8).
- 9) Оцініть похибки експерименту.
- 10) Користуючись теоретико-груповим апаратом, визначить форми нормальних коливань іону $(\text{MnO}_4)^-$ і схематично представте їх у звіті. Визначить, яке з нормальних коливань $(\text{MnO}_4)^-$ відповідальне за наявність коливальної структури електронного спектру молекули KMnO_4 . Обґрунтуйте свою думку.

Контрольні питання

- 1) Яку симетрію має аніон MnO_4^- ? До якої точкової групи симетрії він належить? Відповідь обґрунтуйте.
- 2) Опишіть процедуру визначення форм нормальних коливань за допомогою теорії груп.
- 3) У яких спектрах (ІЧ поглинання чи Романівського розсіювання) активне коливання, що призводить до утворення вібронної структури, що спостерігається у цій роботі. Обґрунтуйте відповідь.
- 4) Сформулюйте принцип Франка-Кондона.
- 5) Поясніть, чому лінії у вібронному спектрі мають різну інтенсивність.
- 6) Коливальну структуру електронних спектрів молекул найчастіше досліджують, використовуючи зразки у газоподібному, а не рідкому стані. Чому? Чому у випадку молекули KMnO_4 вдається записати цю структуру, використовуючи водний розчин молекули?
- 7) Поясніть фізичний зміст константи ангармонізму χ .

Використана література

1. Graves, Russel. *Home Optical Spectrometry: The B&W Tek BTC100-2S*. Syonyk's Project Blog, 28 Jan. 2023, <https://www.sevarg.net/2023/01/28/bw-tek-btc100-spectrometer/>. Accessed 7 May 2025.
2. Ballhausen, C.J. «A vibrational analysis of the MnO^{-4} bands». *Theoret. Chim. Acta* 1, 1963, pp 285–293
3. Hollas, J. Michael. *Modern Spectroscopy*. 4th ed., Wiley, 2004.
4. Пацай І.О.. *Лекція 3: Елементи симетрії та точкові групи*. 2016, <https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2016/11/lecture-3-1.pdf>.