

Konseptuelle spørsmål:

Q8.1 Hvorfor ville du observere et rent rotasjonsspektrum i mikrobølgeområdet, men et rotasjons-vibrasjonsspektrum i infrarødt område

Q8.2 Faste stoffer utvider seg generelt når temperaturen øker. En slik utvidelse skyldes en økning i bindingslengden mellom tilstøtende atomer ettersom den vibrasjonelle amplituden øker. Vil et harmonisk potensial føre til termisk ekspansjon? Vil et Morse-potensial føre til termisk ekspansjon?

Q8.3 Hvordan er det mulig å observere vibrasjonelle overganger i Raman-spektroskopi ved bruk av lasere med synlig lys, der fotonenergien er mye større enn avstanden mellom vibrasjonsenergiene?

Q8.12 Hva er forskjellen mellom et permanent og et dynamisk dipolmoment?

Q8.6 Hva er forskjellen mellom overgangsdipolmomentet og det dynamiske dipolmomentet?

Q8.7 Nitrogen og oksygen absorberer ikke infrarød stråling og er derfor ikke drivhusgasser. Forklar hvorfor dette er tilfellet. Dvs. forklar både hvorfor de ikke absorberer IR-stråling og hvorfor dette er relevant for drivhuseffekten.

Q8.9 Hvilken egenskap ved Morse-potensialet gjør det egnet for å modellere dissosiasjon av et diatomisk molekyl?

Q8.10 Hvis rotasjonsnivåene til et diatomisk molekyl var jevnt fordelt og utvalgregelen forble uendret, hvordan ville utseendet til det rotasjons-vibrasjonelle spekteret i Figur 8.17 endres?

Q8.13 Hva er forklaringen på fraværet av en topp i det rotasjons-vibrasjonelle spekteret nær 3000 cm^{-1} i Figur 8.17?

Q8.16 Kvadratet av flere vibrasjonelle energiegentilstander er vist overlatt på en Morse-potensial i den medfølgende figuren. Tildel kvantetall til de viste nivåene. Forklar forskjellene i formen på egentilstandene sammenlignet med de for en harmonisk potensial.

Q8.22 Sett følgende molekyler i økende rekkefølge fra laveste til høyeste vibrasjonelle energinivå: H_2 , HD, D_2 . Forklar din begrunnelse.

Q8.21 Tenk på et vibrasjonelt energinivå for et diatomisk molekyl beskrevet av potensialfunksjonen

$$V(x) = \frac{(x - x_e)^2}{2}$$

Avstanden mellom de to klassiske snupunktene der den horisontale linjen som representerer energinivået krysser potensialfunksjonen, er et mål på den vibrasjonelle amplituden. Angi hvordan denne vibrasjonelle amplituden varierer hvis:

- a. Likevektsbindingslengden x_e økes mens kvantetallet n og molekylets reduserte masse μ forblir konstant.
- b. Kvantetallet n økes mens likevektsbindingslengden x_e og molekylets reduserte masse μ forblir konstant.
- c. Molekylets reduserte masse μ økes mens kvantetallet n og likevektsbindingslengden x_e forblir konstant.

Regneoppgaver

P8.1 Molekylet $^1\text{H}^{19}\text{F}$ kan beskrives ved et Morse-potensial med $D_e = 9.05 \times 10^{-19} \text{ J}$. Kraftkonstanten k for dette molekylet er 966 N m^{-1} og $\nu = 1.24 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$.

- a. Beregn de fire laveste energinivåene for en Morse-potensial ved å bruke formelen

$$E_n = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{h^2\nu^2}{4D_e} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$

- Beregn grunnfrekvensen ν_0 som tilsvarer overgangen $n = 0 \rightarrow n = 1$ og frekvensene til de to første overtonevibrasjonene. Hvor stor ville den relative feilen være dersom du antar at de to første overtonefrekvensene er $2\nu_0$ og $3\nu_0$?

P8.2 Det infrarøde spekteret til $^{127}\text{I}^{79}\text{Br}$ har en intens linje ved $268,4 \text{ cm}^{-1}$. Beregn kraftkonstanten og vibrasjonsperioden til dette molekylet.

P8.5 Vis at Morse-potensialet nærmer seg det harmoniske potensialet for små verdier av vibrasjonsamplituden. (Hint: Utvid Morse-potensialet i en Taylor–Maclaurin-rekke.)

P8.9 Et sterkt absorpsjonsbånd i det infrarøde området av det elektromagnetiske spekteret observeres ved $\nu = 378 \text{ cm}^{-1}$ for $^{27}\text{Al}^{79}\text{Br}$. Anta at det harmoniske potensialet gjelder, og beregn grunnfrekvensen ν i enheter av inverse sekunder, vibrasjonsperioden i sekunder, og nullpunktsenergien for molekylet i joule og elektronvolt.

P8.15 Vis at en anharmonisk oscillator beskrevet av Morse-potensialet,

$$V(x) = D_e \left(1 - \exp \left(-\sqrt{\frac{2k}{D_e}} (x - x_e) \right) \right)^2 - D_e$$

har en likevektslengde x_e og en dybde D_e .

P8.24 Et infrarødt absorpsjonsspektrum av en organisk forbindelse er vist i figuren nedenfor. Bruk de karakteristiske gruppefrekvensene som er listet opp i Seksjon 8.5 for å avgjøre om denne forbindelsen mest sannsynlig er etylamin, pentanol eller aceton.

Konseptuelle spørsmål:

Q8.1 Hvorfor ville du observere et rent rotasjonsspektrum i mikrobølgeområdet, men et rotasjons-vibrasjonsspektrum i infrarødt område

Q8.2 Faste stoffer utvider seg generelt når temperaturen øker. En slik utvidelse skyldes en økning i bindingslengden mellom tilstøtende atomer ettersom den vibrasjonelle amplituden øker. Vil et harmonisk potensial føre til termisk ekspansjon? Vil et Morse-potensial føre til termisk ekspansjon?

Q8.3 Hvordan er det mulig å observere vibrasjonelle overganger i Raman-spektroskopi ved bruk av lasere med synlig lys, der fotonenergien er mye større enn avstanden mellom vibrasjonsenergiene?

Q8.12 Hva er forskjellen mellom et permanent og et dynamisk dipolmoment?

Q8.6 Hva er forskjellen mellom overgangsdipolmomentet og det dynamiske dipolmomentet?

Q8.7 Nitrogen og oksygen absorberer ikke infrarød stråling og er derfor ikke drivhusgasser. Forklar hvorfor dette er tilfellet. Dvs. forklar både hvorfor de ikke absorberer IR-stråling og hvorfor dette er relevant for drivhuseffekten.

Q8.9 Hvilken egenskap ved Morse-potensialet gjør det egnet for å modellere dissosiasjon av et diatomisk molekyl?

Q8.10 Hvis rotasjonsnivåene til et diatomisk molekyl var jevnt fordelt og utvalgregelen forble uendret, hvordan ville utseendet til det rotasjons-vibrasjonelle spekteret i Figur 8.17 endres?

Q8.13 Hva er forklaringen på fraværet av en topp i det rotasjons-vibrasjonelle spekteret nær 3000 cm^{-1} i Figur 8.17?

Q8.16 Kvadratet av flere vibrasjonelle energiegentilstander er vist overlatt på en Morse-potensial i den medfølgende figuren. Tildel kvantetall til de viste nivåene. Forklar forskjellene i formen på egentilstandene sammenlignet med de for en harmonisk potensial.

Q8.22 Sett følgende molekyler i økende rekkefølge fra laveste til høyeste vibrasjonelle energinivå: H_2 , HD, D_2 . Forklar din begrunnelse.

Q8.21 Tenk på et vibrasjonelt energinivå for et diatomisk molekyl beskrevet av potensialfunksjonen

$$V(x) = \frac{(x - x_e)^2}{2}$$

Avstanden mellom de to klassiske snupunktene der den horisontale linjen som representerer energinivået krysser potensialfunksjonen, er et mål på den vibrasjonelle amplituden. Angi hvordan denne vibrasjonelle amplituden varierer hvis:

- a. Likevektsbindingslengden x_e økes mens kvantetallet n og molekylets reduserte masse μ forblir konstant.
- b. Kvantetallet n økes mens likevektsbindingslengden x_e og molekylets reduserte masse μ forblir konstant.
- c. Molekylets reduserte masse μ økes mens kvantetallet n og likevektsbindingslengden x_e forblir konstant.

Regneoppgaver

P8.1 Molekylet $^1\text{H}^{19}\text{F}$ kan beskrives ved et Morse-potensial med $D_e = 9.05 \times 10^{-19} \text{ J}$. Kraftkonstanten k for dette molekylet er 966 N m^{-1} og $\nu = 1.24 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$.

- a. Beregn de fire laveste energinivåene for en Morse-potensial ved å bruke formelen

$$E_n = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{h^2\nu^2}{4D_e} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$

- Beregn grunnfrekvensen ν_0 som tilsvarer overgangen $n = 0 \rightarrow n = 1$ og frekvensene til de to første overtonevibrasjonene. Hvor stor ville den relative feilen være dersom du antar at de to første overtonefrekvensene er $2\nu_0$ og $3\nu_0$?

P8.2 Det infrarøde spekteret til $^{127}\text{I}^{79}\text{Br}$ har en intens linje ved $268,4 \text{ cm}^{-1}$. Beregn kraftkonstanten og vibrasjonsperioden til dette molekylet.

P8.5 Vis at Morse-potensialet nærmer seg det harmoniske potensialet for små verdier av vibrasjonsamplituden. (Hint: Utvid Morse-potensialet i en Taylor–Maclaurin-rekke.)

P8.9 Et sterkt absorpsjonsbånd i det infrarøde området av det elektromagnetiske spekteret observeres ved $\nu = 378 \text{ cm}^{-1}$ for $^{27}\text{Al}^{79}\text{Br}$. Anta at det harmoniske potensialet gjelder, og beregn grunnfrekvensen ν i enheter av inverse sekunder, vibrasjonsperioden i sekunder, og nullpunktsenergien for molekylet i joule og elektronvolt.

P8.15 Vis at en anharmonisk oscillator beskrevet av Morse-potensialet,

$$V(x) = D_e \left(1 - \exp \left(-\sqrt{\frac{2k}{D_e}} (x - x_e) \right) \right)^2 - D_e$$

har en likevektslengde x_e og en dybde D_e .

P8.24 Et infrarødt absorpsjonsspektrum av en organisk forbindelse er vist i figuren nedenfor. Bruk de karakteristiske gruppefrekvensene som er listet opp i Seksjon 8.5 for å avgjøre om denne forbindelsen mest sannsynlig er etylamin, pentanol eller aceton.

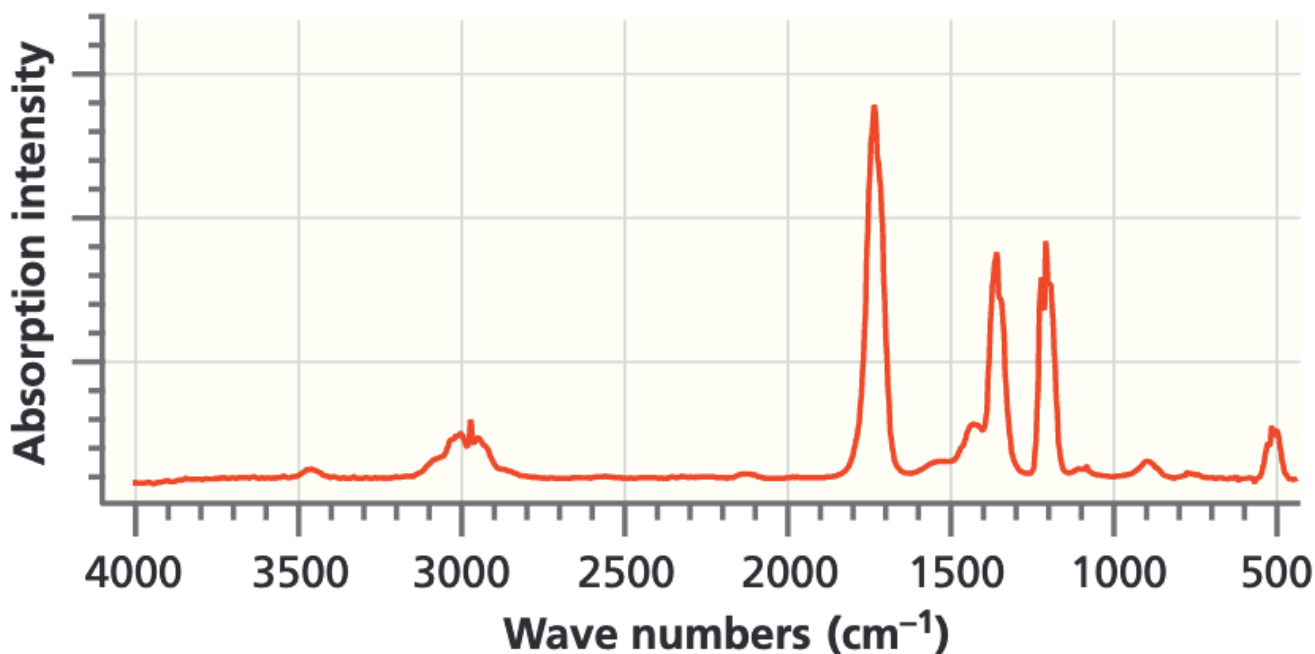


TABLE 8.4 Selected Group Frequencies

Group	Frequency (cm ⁻¹)	Group	Frequency (cm ⁻¹)
O—H stretch	3450–3650	C=O stretch	1650–1750
N—H stretch	3300–3500	C=C stretch	1620–1680
C—H stretch	2800–3000	C—C stretch	1200–1300
C—H bend	1450–1480	C—Cl stretch	600–800