

# Vibrace molekul

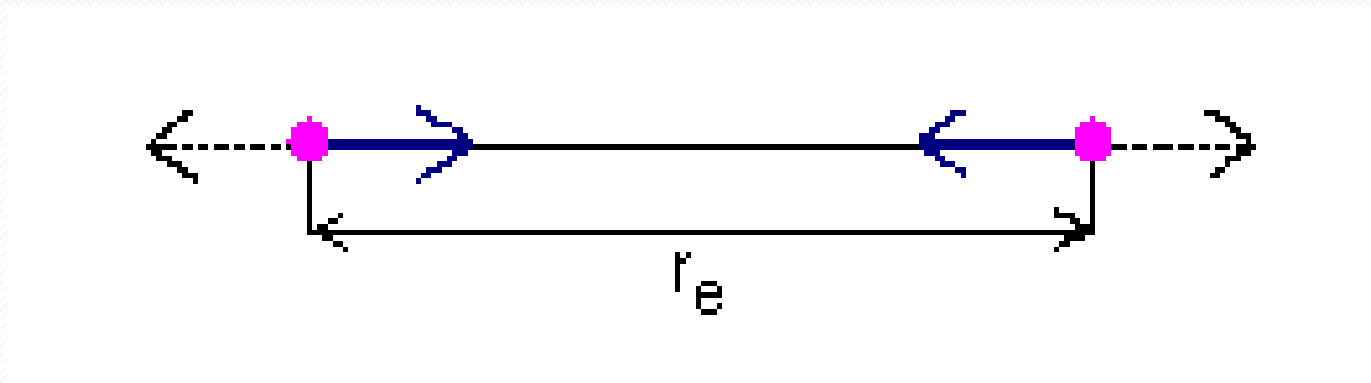
## harmonická aproximace

Brno 2010

Petra Sehnalová

# Dvouatomová molekula

- Atomy – hmotné body - kmitají kolem rovnovážných poloh
- Mohou kmitat pouze jedním způsobem



- $r_e$  značí rovnovážnou vzdálenost atomových jader.

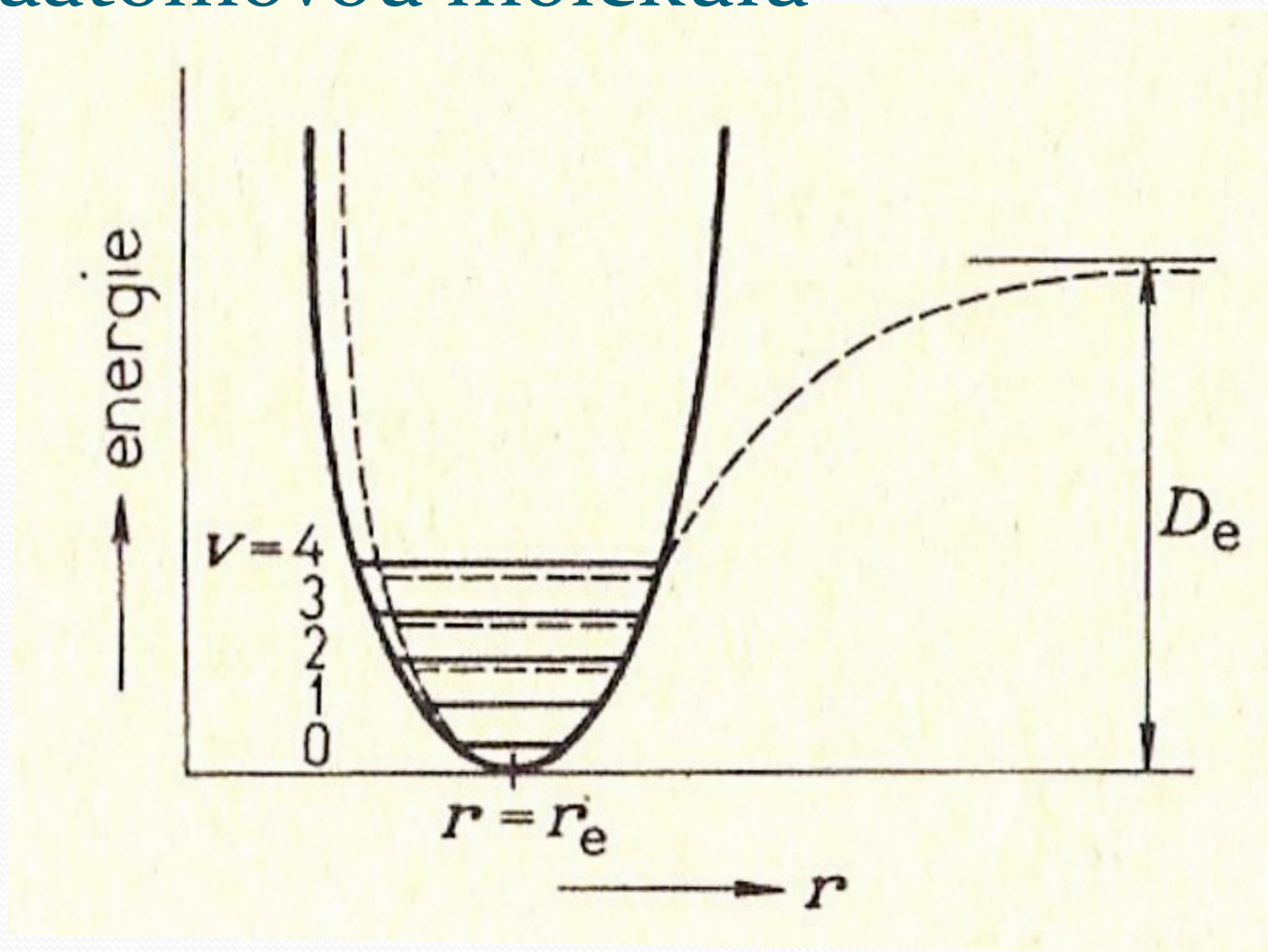
- Potenciální energie  $V(r)$  má v aproximaci lineárního harmonického oscilátoru minimum pro  $r = r_e$ ;

$$V(r) = \frac{1}{2} k (r - r_e)^2$$

- $k$  je silová konstanta
- $(r - r_e)$  udává změnu mezijaderné vzdálenosti proti rovnovážné poloze.
- Energie vibračních hladin dvouatomové molekuly:

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) h\nu = \left(v + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

# Křivka potenciální energie pro dvouatomovou molekulu



# Nelineární víceatomová molekula

- Potenciální energie

$$V = V_0 + \sum_i \left( \frac{\partial V}{\partial q_i} \right)_0 q_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left( \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0 q_i q_j$$

- Po úpravách:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} k_{ij} q_i q_j$$

# Stupně volnosti

- $N$ -atomová molekula  $3N$  stupňů volnosti
- $3N-6$  vibrační stupně volnosti
- Lineární molekula  $3N-5$  vibračních stupňů volnosti
- Vnitřní pohyb vibrující molekuly lze rozložit na jednoduché harmonické vibrační pohyby, tzv. normální vibrace

Děkuji za pozornost 😊

- Literatura:
- Fišer J: Úvod do molekulové symetrie. SNTL Praha, 1980, 194-196