



Petr Mikel

Vibrace skleníkových molekul

Skleníkové molekuly

- CO₂
- CH₄
- N₂O
- CFC (freony)
- Vodní pára

Stupně volnosti

- Molekula: $3n$ stupňů volnosti
 - 3 stupně translační pohyb
 - 3 stupně rotační pohyb (2 u lineární molekuly)

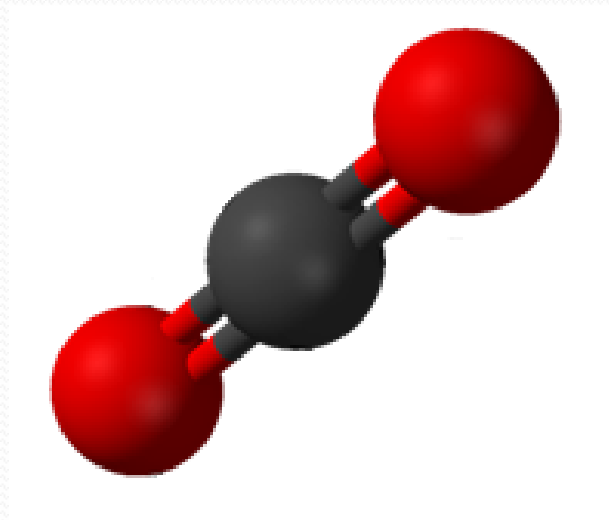
Počet vibračních stupňů volnosti

$$3n - 6$$

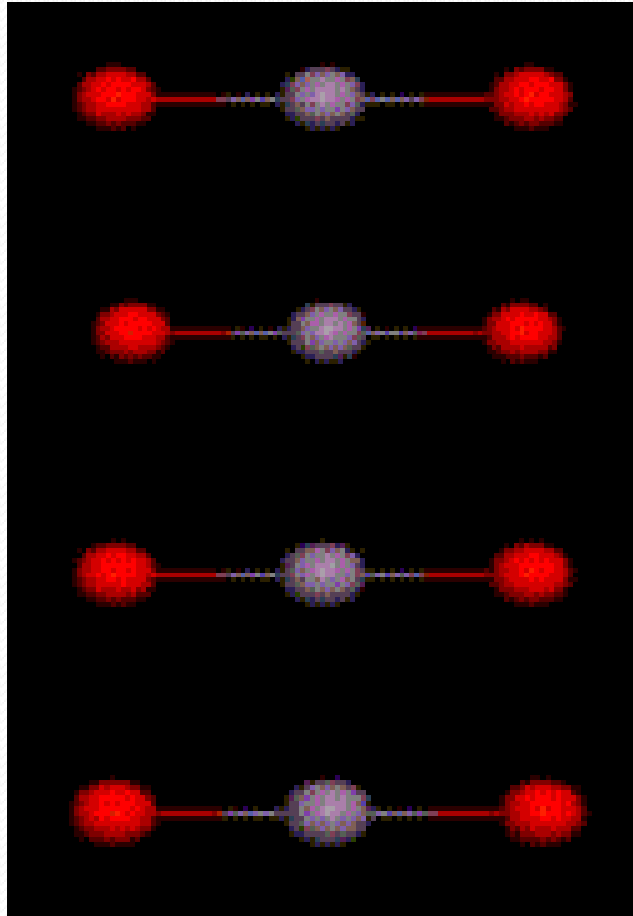
$3n - 5$ pro lineární molekuly

CO₂ - Stupně volnosti

- trojatomová lineární molekula
- 3 stupně translační
- 2 stupně rotační
- 4 stupně vibrační



Vibrace

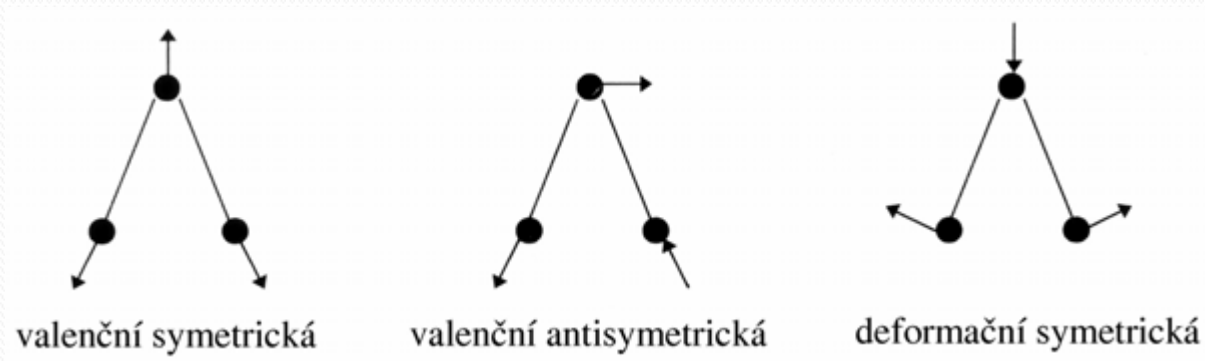


Pohyb a vibrace molekul

- Výměna energie mezi elektromagnetickým polem a molekulami
- Energie musí být stejná jako energie vibračních a rotačních kvant

Základní typy vibrací

- *valenční vibrace* (periodická změna vazebné délky)
- *deformační vibrace* (periodická změna vazebního úhlu)



Aktivita vibrace v IR

- Vibrační energie vazby, případně celé molekuly se může zvýšit absorpcí elektromagnetického záření jen tehdy, mění-li se při vibraci její *dipólový moment*
- Tyto vibrace se označují jako aktivní v infračerveném spektru (molekula absorbuje IR záření)

Energie vibračních kvant

- CO₂ ... $\lambda = 4.17\mu\text{m}, 7.38\mu\text{m}, 14.8\mu\text{m}$
- CH₄ ... $\lambda = 3.3\mu\text{m}, 7.9\mu\text{m}$
- Vodní páry... $\lambda = 5.5 - 7.5 \mu\text{m}$
- Wienův posunovací zákon

IR vibrační spektroskopie

- Identifikace a strukturní charakteristika organických sloučenin a anorganických látek
- Rozsah
 - blízká (0,76 – 5 μm)
 - střední (5 – 30 μm)
 - dlouhé (30 – 1000 μm)

Ramanova spektroskopie – blízké IR $\Delta E = h(\nu_0 - \nu_r)$
-vibrační ener.přechod