

# Vibrace skleníkových molekul

Aneta Malá

F4110

2013

# Osnova

- Vibrace molekul
- Dělení kmitů
- Postup
- Skleníkové molekuly
- Oxid uhličitý
- Oxid dusný
- Voda
- Methan
- Ozon
- Shrnutí
- Použité zdroje

# Vibrace molekul

- Atomy v molekule konající periodický pohyb zatímco molekula jako celek koná konstantní translační či rotační pohyb.
- Vnitřní pohyby molekuly kolem rovnovážných poloh, **těžiště molekul stojí.**
- Malé kmity – vibrace
- Všechny atomy kmitají se stejnou frekvencí, konají **harmonické kmity** – normální vibrační módy molekuly
- Vibrace:
  - $3n - 6$  stupňů volnosti**  
(-6= -3 rotace -3 translace)
  - $3n - 5$  (pro lineární molekuly)**
- Frekvence tohoto periodického pohybu se označuje jako vibrační frekvence

# Dělení kmitů

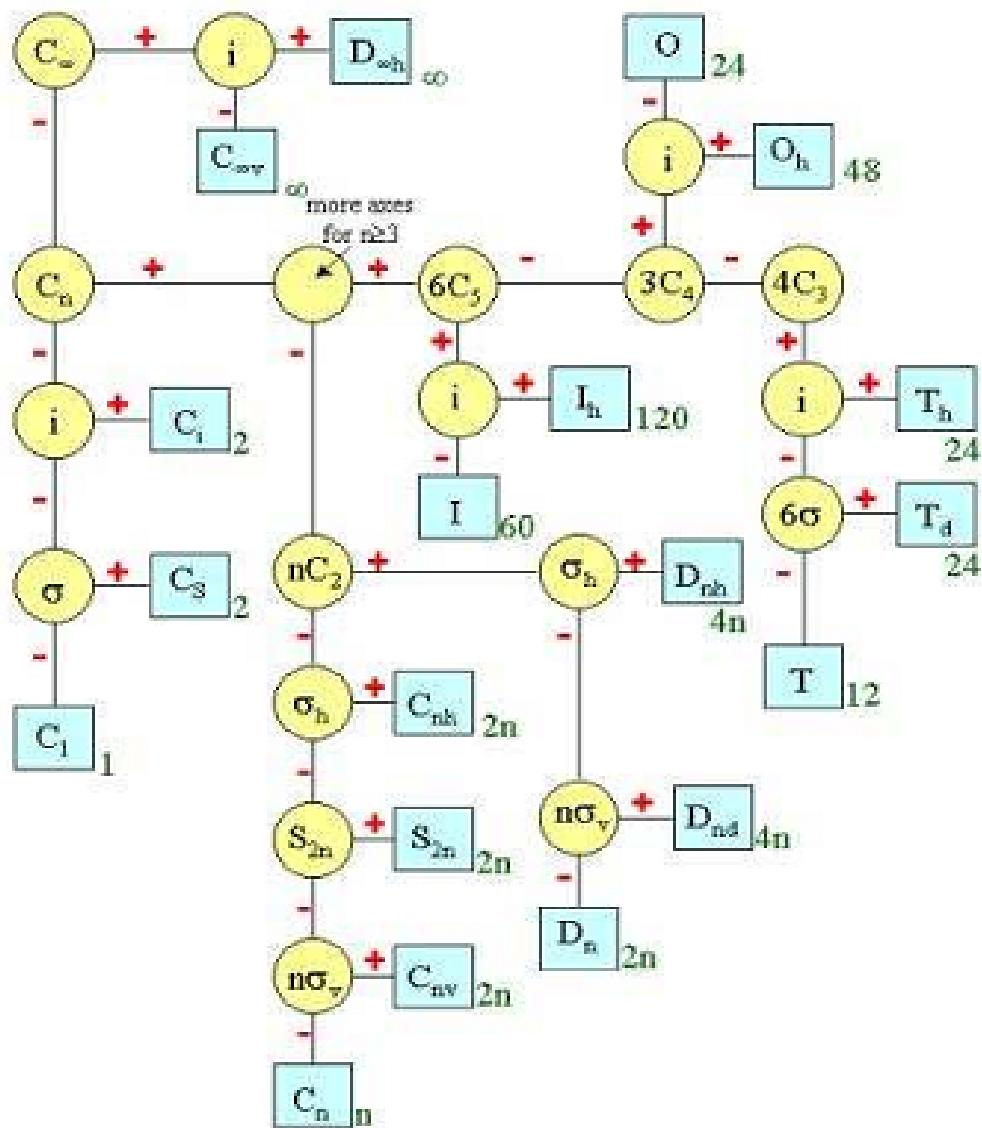
- Délky vazeb se nemění, pouze jejich úhly:
  - bending** – změna úhlu mezi dvěma vazbami,
  - rocking** – změna úhlu mezi skupinou atomů
  - wagging** – změna v úhlu v rovině skupiny atomů,
  - twisting** – změna úhlu rovin dvou skupin atomů,
  - torsion modes** (nízké frekvence)
- Mění se délky vazeb:
  - **stretching modes** (vysoké frekvence)

Dělení normálních kmitů na **podélné** a **příčné**

# Postup

- Zjednodušená představa: atomy-kuličky, vazby-pružiny:  $3N$  homogenních rovnic pro  $3N$  neznámých (řešení zahrnuje i rotace a translace, pro ně je vibrace rovna nule)
  - Určení frekvence vibračních módů
  - Poměr výchylek jednotlivých atomů pro danou vibraci
  - Přímý výpočet pro malé molekuly
- Grupy symetrie:
  - Molekuly lze rozdělit do skupin dle jejich symetrie a následně určit normální módy (využití tabulky charakterů reprezentace grupy symetrie)

## Symetrie 3D molekul

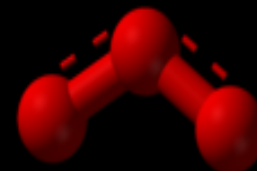
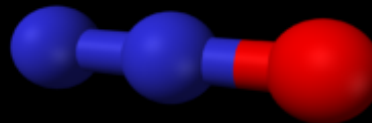
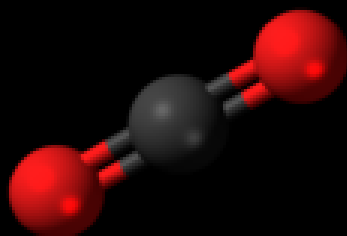
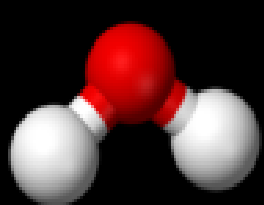


# Skleníkové molekuly

Absorbují a vyzařují v infračerveném pásmu.  
Jsou původci skleníkového efektu.

Přirozené:

voda, oxid uhličitý, metan, oxid dusný, ozon



planární	lineární	čtyřstěn	lineární	planární
AB2	AB2	AB4	A2B	A3

Uměle vytvořené:

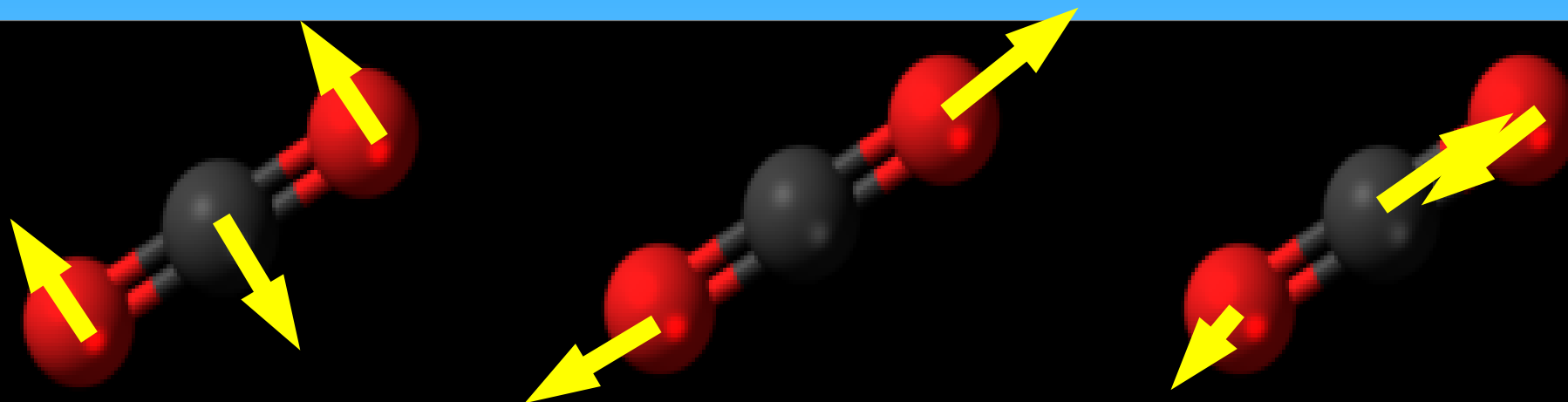
oxid uhličitý, metan, ozon, oxid dusný, částečně a zcela fluorované uhlovodíky, fluorid sírový, tvrdé a měkké freony, halony, ...

# Oxid uhličitý

v1  
667 cm<sup>-1</sup>

v2  
1388 cm<sup>-1</sup>

v3  
2349 cm<sup>-1</sup>



- 4 vibrační módy = 2 v1 + v2 + v3
- 2 IR aktivní
- Má symetrii válce
- Grupa symetrie: D<sup>∞</sup>h



# Oxid dusný

v1

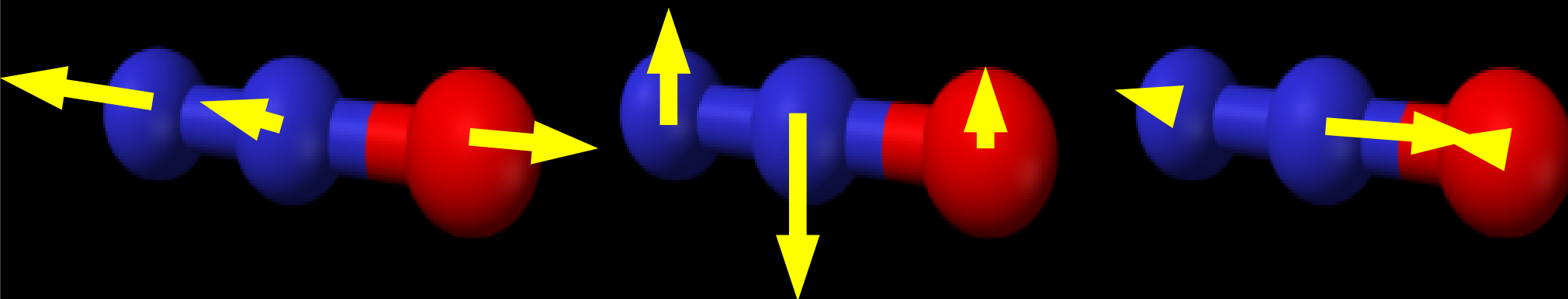
1298,3 cm<sup>-1</sup>

v2

596,3 cm<sup>-1</sup>

v3

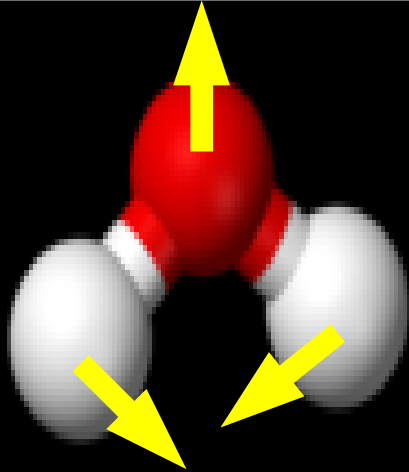
2282,2 cm<sup>-1</sup>



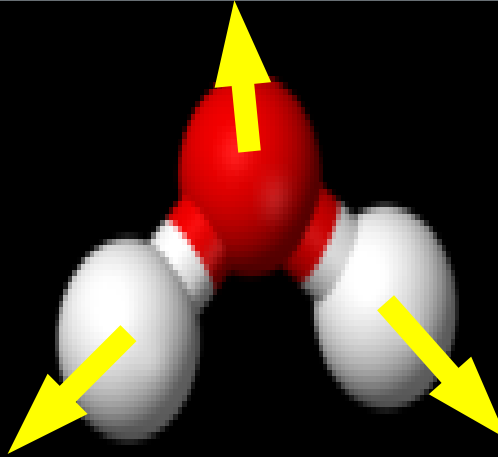
- 4 vibrační módy (všechny IR aktivní)
- $v_1+2v_2+v_3$
- Podobný CO<sub>2</sub>, ale má menší symetrii
- Grupa symetrie:  $D_{\infty v}$

# Voda

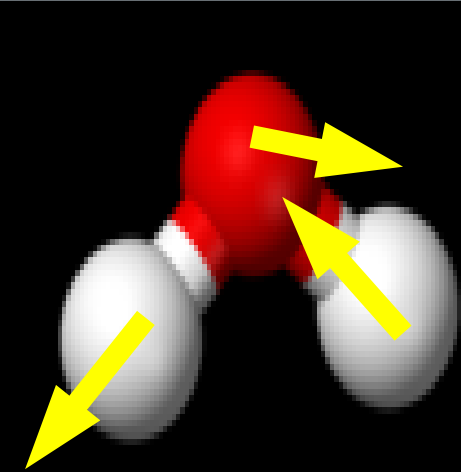
1711,15 cm<sup>-1</sup>



3730,03 cm<sup>-1</sup>



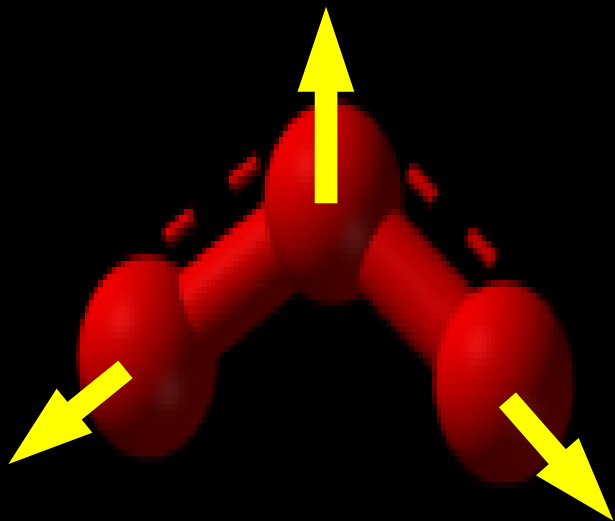
3851,06 cm<sup>-1</sup>



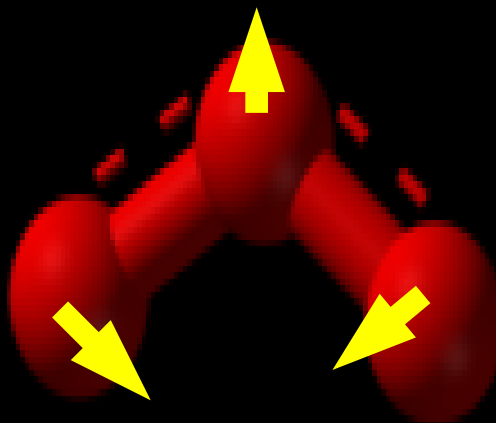
- 3 vibrační módy
- Rovinná molekula
- Grupa symetrie: C<sub>2v</sub>

# Ozon

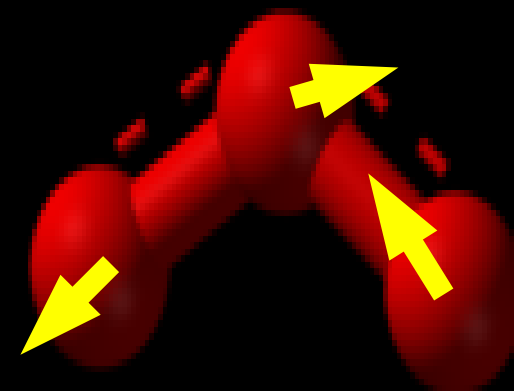
1209,71  $\text{cm}^{-1}$



856,78  $\text{cm}^{-1}$



855,78  $\text{cm}^{-1}$



- 3 vibrační módy
- Rovinná molekula
- Podobné jako molekula vody

# Methan

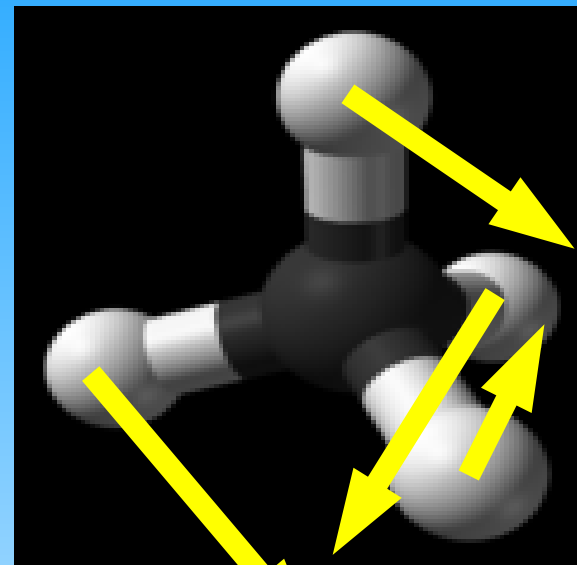
$$V1 = 1376 \text{ cm}^{-1}$$

$$V2 = 1598 \text{ cm}^{-1}$$

$$V3 = 3054 \text{ cm}^{-1}$$

$$V4 = 3167 \text{ cm}^{-1}$$

- Nejjednodušší uhlíkovodík
- Čtyřstěnná molekula
- Grupa symetrie:  $T_d$
- 9 módů, pouze některé IR aktivní (tam, kde se hýbe vodík i uhlík –  $v1$ ,  $v4$ )
- $3v1 + 2v2 + v3 + 3v4$



1598  $\text{cm}^{-1}$

# Shrnutí

- Skleníkové molekuly přírodního původu jsou poměrně malé molekuly.
- IR aktivní jsou módy, kde se hýbou vůči sobě různé atomy (např. C-H u methanu).

## Použité zdroje

- Materiály k přednášce F4110 Kvantová fyzika atomárních soustav 2013
- <http://en.wikipedia.org/>
- <http://www.chemtube3d.com/>
- [http://artemis.osu.cz/mmfyz/am/am\\_6\\_5\\_1.htm](http://artemis.osu.cz/mmfyz/am/am_6_5_1.htm)
- [http://www2.ess.ucla.edu/~schauble/molecular\\_vibrations.htm](http://www2.ess.ucla.edu/~schauble/molecular_vibrations.htm)
- José Zúñiga, Adolfo Bastida, Alberto Requena, Theoretical calculations of vibrational frequencies and rotational constants of the N<sub>2</sub>O isotopomers, Journal of Molecular Spectroscopy, Volume 217, Issue 1, January 2003, Pages 43-58, ISSN 0022-2852, 10.1016/S0022-2852(02)00014-0.  
(<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022285202000140>)
- KREJČÍKOVÁ, Magdaléna. N-metylacetamid, vzorová molekula pro modelování vibrací aminokyselin [online]. [cit. 2013-06-12]. Bakalářská práce. Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta. Vedoucí práce Dušan Hemzal. Dostupné z: <[http://is.muni.cz/th/380131/prif\\_b/](http://is.muni.cz/th/380131/prif_b/)>

Děkuji za pozornost.