

VIBRAČNÉ ÚROVNE ENERGIE

- kvantovaním vibračných pohybov - približne harmonické.

Dvojatómová molekula - 1. stupen' voľnosti - zvoľa
vzdialenosti r medzi A. J $\Rightarrow$ harmonický osci-
látor $\Rightarrow$ rovnako utvárané úrovně energie

$$E_{vib} = h\nu (n + 1/2) \quad (*)$$

ν - základná frekvencia harmonického osci-
látoru n - vibračné kvantové číslo.

$$V(r) = V(r_0) + (r-r_0) \frac{dV}{dr} + \frac{(r-r_0)^2}{2!} \frac{d^2V}{dr^2} + \frac{(r-r_0)^3}{3!} \frac{d^3V}{dr^3}$$

minimálna
v extrémne je
derivácia nula

pre nultú deriváciu
možno zanedbať
 $(r-r_0)^3 \rightarrow 0$

$$\Rightarrow V(r) = V(r_0) + \frac{1}{2} (r-r_0)^2 \frac{d^2V}{dr^2} \quad (*)$$

$\uparrow$ Potenciál harmonického oscilátora
s konštantou pružnosti $k = d^2V/dr^2$

Frekvencia oscilátora

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Z tohto rovnice vidíme, že potenciál (*) závisí od

vzdialenosti medzi vibračnými jadrami je

$h\nu \sim 0.1 \text{ eV} \Rightarrow$ infračervené žiarenie.

Vzťahujeme medzi vibračnými jadrami o 2-3 rády
väčšia ako medzi rotáciami.

Potenciál: rastie - rýchlejšie pre $r < r_0$

ponúka pre $r > r_0$

a narastá s odchýlkou od rovnováž-
nej polohy $\Rightarrow$ dôsledky