ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά μαθήματα ΠΠ

ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

Ενότητα 4
Φάσματα περιστροφής πολυατομικών μορίων

Δημήτρης Κονταρίδης

Αναπληρωτής Καθηγητής

Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Χημικών Μηχανικών

Ενδεικτική βιβλιογραφία

1. **ATKINS, ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ**
   P.W. Atkins, J. De Paula
   (Atkins' Physical Chemistry, 9th Edition, 2010)
   Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2014

2. **ΣΤΟΙΧΕΙΩΔΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ**
   Στέφανος Τραχανάς
   Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2012

3. **ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ**
   Φ. Νταής
   Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Πάτρα, 2001

4. **PHYSICAL CHEMISTRY: A Molecular Approach**
   D.A. McQuarrie, J.D. Simon
   University Science Books, Sausalito, California, 1997

5. **PRINCIPLES OF PHYSICAL CHEMISTRY,** 2nd Edition
   H. Kuhn, H.-D. Forsterling, D.H. Waldeck
   John Wiley & Sons, Inc., 2000

4

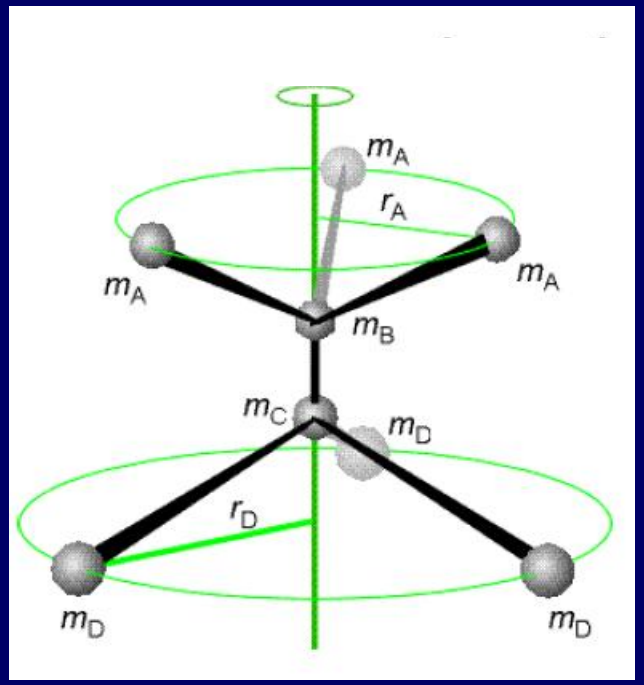
Φάσματα περιστροφής πολυατομικών μορίων

Ροπή αδράνειας

Η ροπή αδράνειας ορίζεται γενικά ως εξής:

$$I = \sum m_i r_i^2$$

Image.url



Στο μόριο του σχήματος υπάρχουν τρία όμοια άτομα συνδεδεμένα στο άτομο B και τρία διαφορετικά αλλά μεταξύ τους όμοια άτομα συνδεδεμένα με το άτομο C.

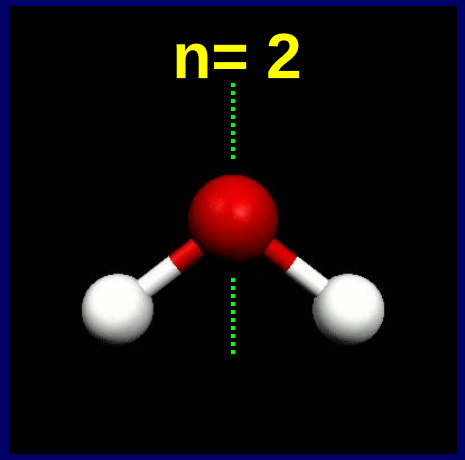
$$I = 3m_A r_A^2 + 3m_D r_D^2$$

Προσέξτε τον τρόπο με τον οποία μετρούνται οι αποστάσεις r_A και r_D.

Παράδειγμα

Να υπολογιστεί η ροπή αδράνειας του μορίου του H_2O γύρω από τον άξονα που διχοτομεί τη γωνία HOH.

Image.url

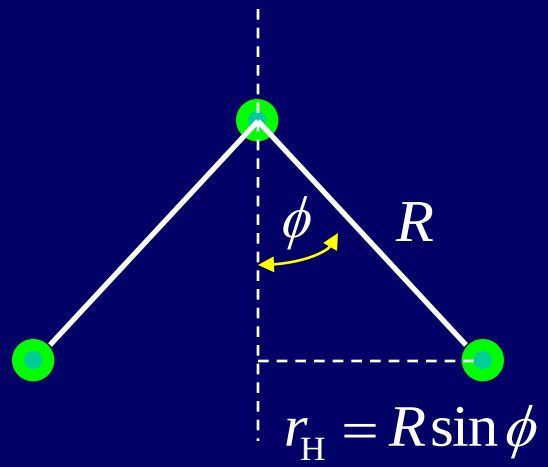


Έστω ότι η γωνία μεταξύ των δύο δεσμών O-H είναι 2φ και το μήκος τους είναι R.

$$I = \sum_i m_i r_i^2 \quad = m_H r_H^2 + 0 + m_H r_H^2 \quad = 2 m_H r_H^2$$

$$\Rightarrow I = 2 m_H R^2 \sin^2 \phi$$

$2\varphi = 104{,}5^o$
$R = 95{,}7$ pm

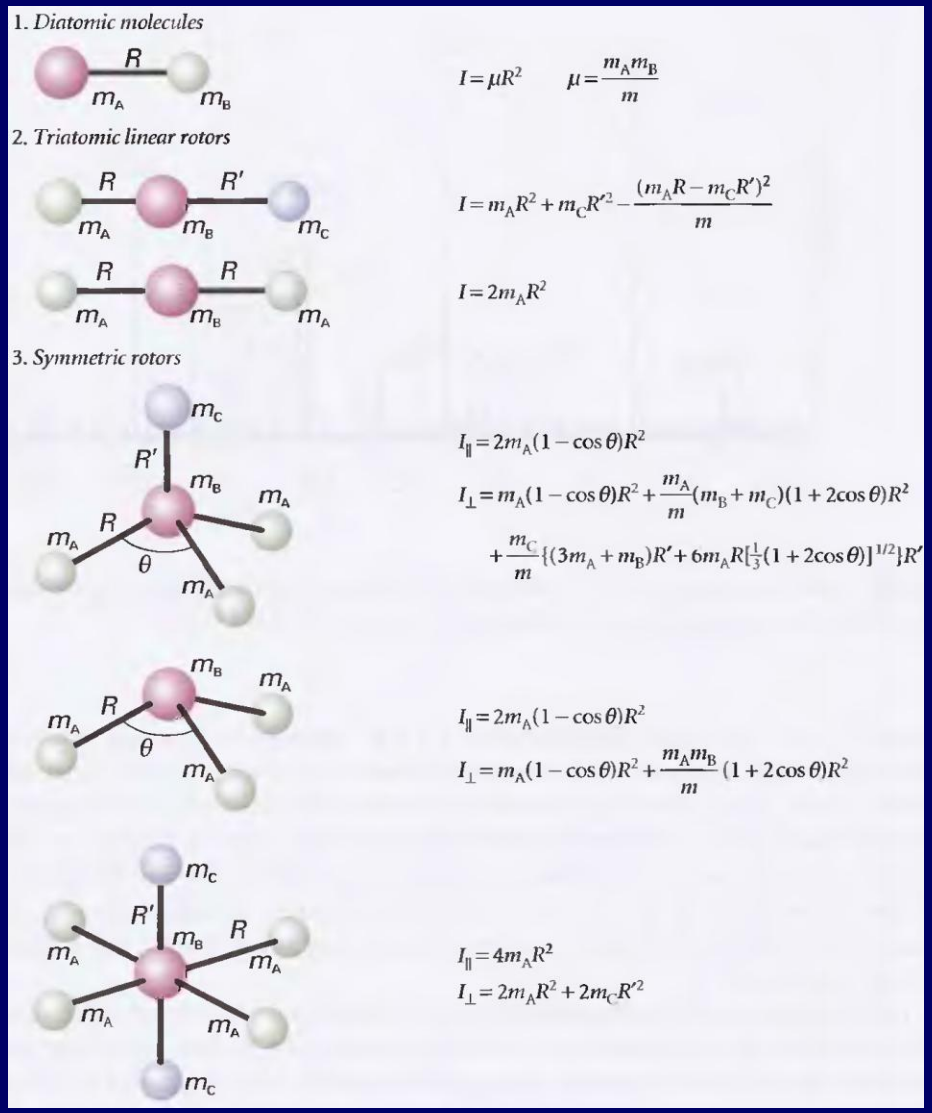


$$I = 2 \times \left(1{,}67 \times 10^{-27} kg\right) \times \left(9{,}57 \times 10^{-11} m\right)^2 \times \sin^2 52{,}3^o$$

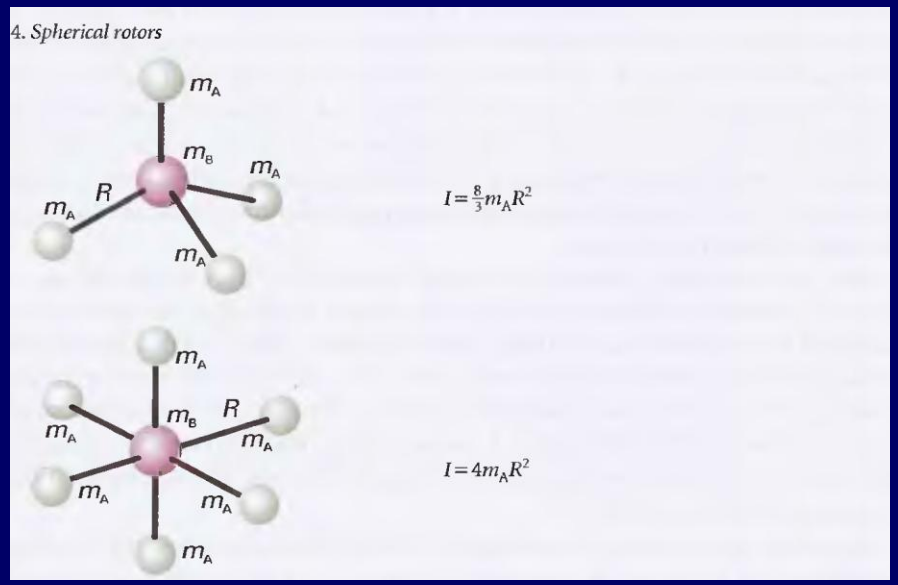
$$\Rightarrow \boxed{I = 1{,}91 \times 10^{-47} \text{ kg m}^2}$$

Ροπή αδράνειας

Εικόνα1



Σε κάθε περίπτωση, με *m* συμβολίζεται η συνολική μάζα του μορίου.



Οι ροπές αδράνειας για ορισμένες κατηγορίες συμμετρικών μορίων

Πολυατομικά μόρια

Τα πολυατομικά μόρια έχουν διάφορα μεγέθη και σχήματα. Μπορούν όμως να ταξινομηθούν με βάση τη συμμετρία τους.

Η συμμετρία των πολυατομικών μορίων επηρεάζει και την τιμή της ροπής αδράνειάς τους, ως προς τους τρεις κύριους άξονες περιστροφής τους.

Ανάλογα με τα σχετικά μεγέθη των ροπών αδράνειας ως προς τους άξονες περιστροφής τους (I_a, I_b, I_c), τα μόρια ταξινομούνται ως εξής:

1. Σφαιρικά μόρια (σφαιρικοί στροφείς)	$I_a = I_b = I_c$	(π.χ. CH_4, SiH_4, SF_6)
2. Γραμμικά μόρια (γραμμικοί στροφείς)	$I_a = I_b \neq I_c$ και $I_c = 0$	(π.χ. CO_2, OCS, HC≡CH)
3. Αξονικά συμμετρικά μόρια (συμμετρικοί στροφείς)	$I_a = I_b$ και $I_c \neq 0$	(π.χ. NH_3, CH_3Cl)
4. Ασύμμετρα μόρια (ασύμμετροι στροφείς)	$I_a \neq I_b \neq I_c \neq 0$	(π.χ. H_2O, CH_3OH)

Πολυατομικά μόρια – Σφαιρικοί στροφείς

Στα σφαιρικά μόρια, οι τρεις ροπές αδράνειας είναι ίσες μεταξύ τους, και οι τρεις άξονες περιστροφής είναι ισοδύναμοι:

$$I_a = I_b = I_c$$

π.χ. μεθάνιο (CH_4), σιλάνιο (SiH_4), εξαφθοριούχο θείο (SF_6).

Image.url

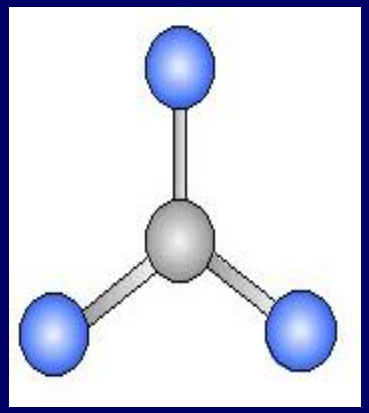


Image.url

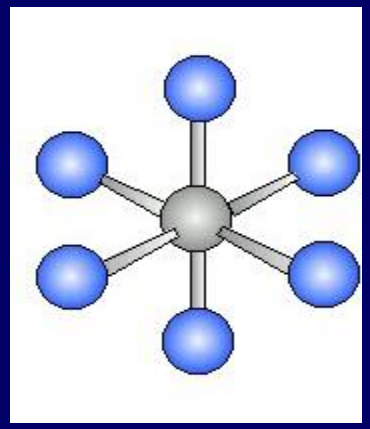
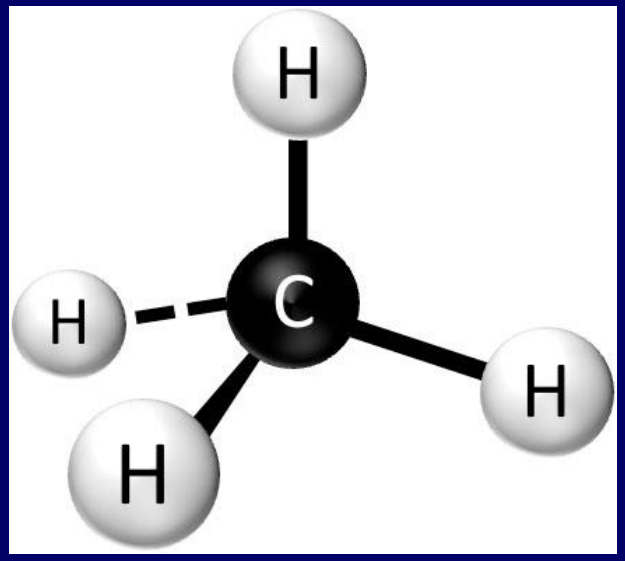


Image.url



Τα σφαιρικά μόρια δεν έχουν διπολική ροπή και, για το λόγο αυτό, δε δίνουν φάσμα περιστροφής (τουλάχιστον θεωρητικά).

Πολυατομικά μόρια – Σφαιρικοί στροφείς

Ενέργεια περιστροφής γύρω από τους τρεις άξονες a, b, c:

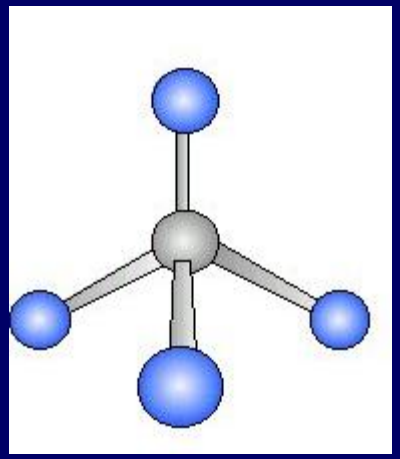
$$E = \frac{1}{2} I_a \omega_a^2 + \frac{1}{2} I_b \omega_b^2 + \frac{1}{2} I_c \omega_c^2$$

Κλασική στροφορμή : $J = I\omega$

$$I_a = I_b = I_c = I$$

$$E = \frac{J_a^2}{2I_a} + \frac{J_b^2}{2I_b} + \frac{J_c^2}{2I_c} \Rightarrow \boxed{E = \frac{J^2}{2I}}$$

Image.url



όπου J είναι το μέτρο της στροφορμής.

Από την κβαντική μηχανική γνωρίζουμε ότι:

$$J^2 = J(J+1)\hbar^2$$ όπου $J = 0, 1, 2, \ldots$

Επομένως, η ενέργεια ενός σφαιρικού στροφέα παίρνει τις τιμές:

$$\boxed{E = J(J+1)\frac{\hbar^2}{2I} \quad \text{με} \quad J = 0, 1, 2, \ldots}$$

Πολυατομικά μόρια – Συμμετρικοί στροφείς

Στους συμμετρικούς στροφείς, οι δύο ροπές αδράνειας είναι ίσες μεταξύ τους, αλλά διαφέρουν ως προς την τρίτη:

$$I_a \neq I_b = I_c$$

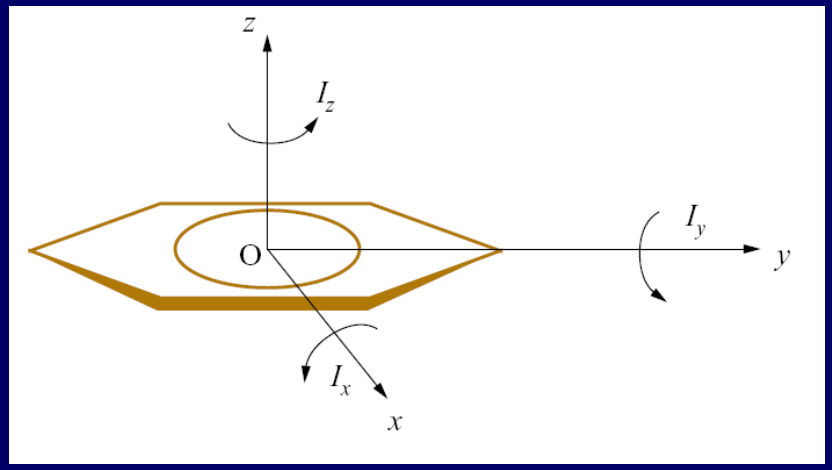
Ο άξονας *a* (με τη διαφορετική ροπή) είναι ο "άξονας σχήματος" του μορίου.

Η ροπή αδράνειας περί τον "άξονα σχήματος" συμβολίζεται με $I_{\parallel}$ και οι άλλες δύο με $I_{\perp}$

$$I_{\parallel} > I_{\perp}$$

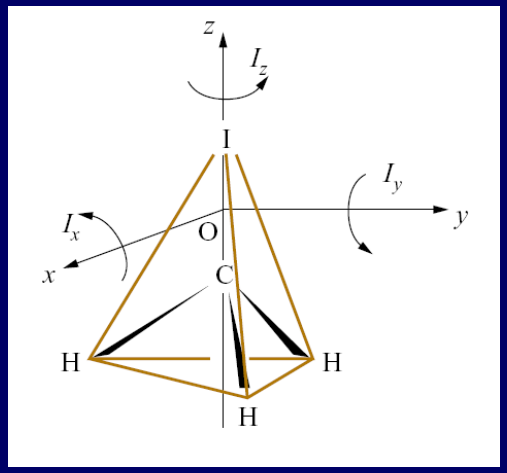
$$I_{\parallel} < I_{\perp}$$

Εικόνα2



Δισκοειδής στροφέας
Πεπλατυσμένα ελλειψοειδή

Εικόνα3



Ραβδοειδής στροφέας
Προμήκη ελλειψοειδή

Πολυατομικά μόρια – Συμμετρικοί στροφείς

$$\left.\begin{aligned} E &= \frac{J_b^2 + J_c^2}{2I_\perp} + \frac{J_a^2}{2I_\square} \\ J^2 &= J_a^2 + J_b^2 + J_c^2 \end{aligned}\right\} E = \frac{J^2 - J_a^2}{2I_\perp} + \frac{J_a^2}{2I_\square} \Rightarrow \boxed{E = \frac{J^2}{2I_\perp} + \left(\frac{1}{2I_\square} - \frac{1}{2I_\perp}\right) J_a^2}$$

Από την κβαντική μηχανική γνωρίζουμε ότι:

$$J^2 = J\left(J+1\right)\hbar^2$$ όπου $J = 0, 1, 2, \ldots$

Η συνιστώσα της στροφορμής σε ένα άξονα περιορίζεται σε τιμές:

$$J_a = K\hbar$$ όπου $K = 0, \pm 1, \ldots, \pm J$

Το K είναι ο κβαντικός αριθμός που αναφέρεται στη συνιστώσα της στροφορμής στον **άξονα σχήματος**.

Επομένως, $$J_a^2 = K^2\hbar^2$$

Πολυατομικά μόρια – Συμμετρικοί στροφείς

$$\left.\begin{aligned} E &= \frac{J_b^2 + J_c^2}{2I_\perp} + \frac{J_a^2}{2I_\parallel} \\ J^2 &= J_a^2 + J_b^2 + J_c^2 \end{aligned}\right\} E = \frac{J^2 - J_a^2}{2I_\perp} + \frac{J_a^2}{2I_\parallel} \Rightarrow \boxed{E = \frac{J^2}{2I_\perp} + \left(\frac{1}{2I_\parallel} - \frac{1}{2I_\perp}\right) J_a^2}$$

Από την κβαντική μηχανική γνωρίζουμε ότι:

$$J^2 = J\left(J+1\right)\hbar^2$$ όπου $J = 0, 1, 2, \ldots$

Η συνιστώσα της στροφορμής σε ένα άξονα περιορίζεται σε τιμές:

$$J_a = K\hbar$$ όπου $K = 0, \pm 1, \ldots, \pm J$

Αντικαθιστώντας, οι περιστροφικοί όροι γίνονται:

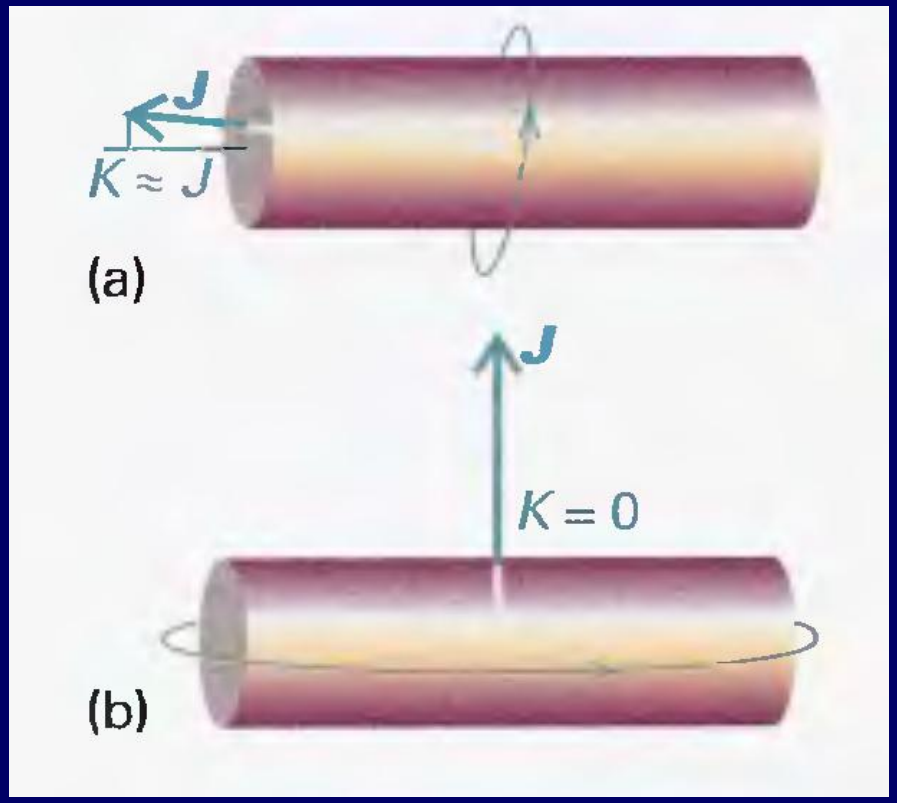
$$F(J,K) = BJ\left(J+1\right) + (A-B)K^2$$ όπου $J = 0, 1, 2, \ldots$

$K = 0, \pm 1, \ldots, \pm J$

$$A = \frac{\hbar}{4\pi c I_\parallel} \qquad B = \frac{\hbar}{4\pi c I_\perp}$$

Πολυατομικά μόρια – Συμμετρικοί στροφείς

Εικόνα4



Τα ενεργειακά επίπεδα εξαρτώνται από τις 2 ροπές αδράνειας του μορίου.

Όταν $K=\pm J$, όλη σχεδόν η στροφορμή οφείλεται στην περιστροφή του μορίου γύρω από τον άξονα σχήματος.

Όταν $K=0$, δεν υπάρχει συνιστώσα της στροφορμής στον άξονα σχήματος, και το μόριο περιστρέφεται γύρω από τον κάθετο άξονα.

$$F(J,K) = BJ\left(J+1\right) + (A-B)K^2$$

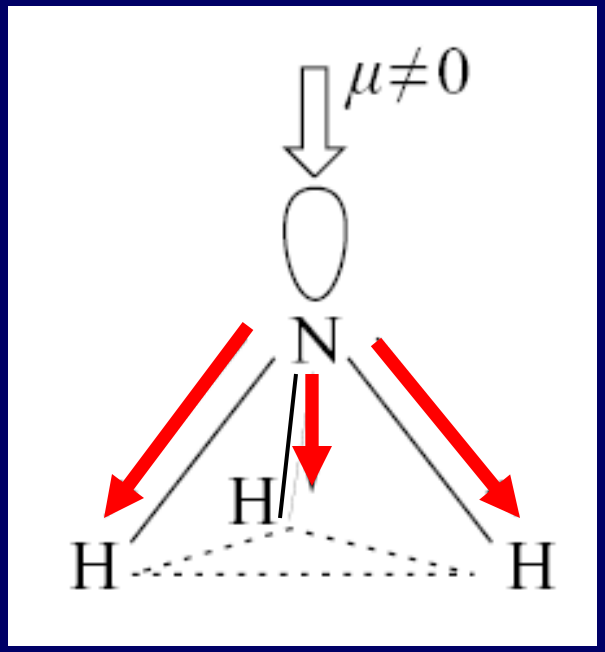
όπου $J = 0, 1, 2, \ldots$

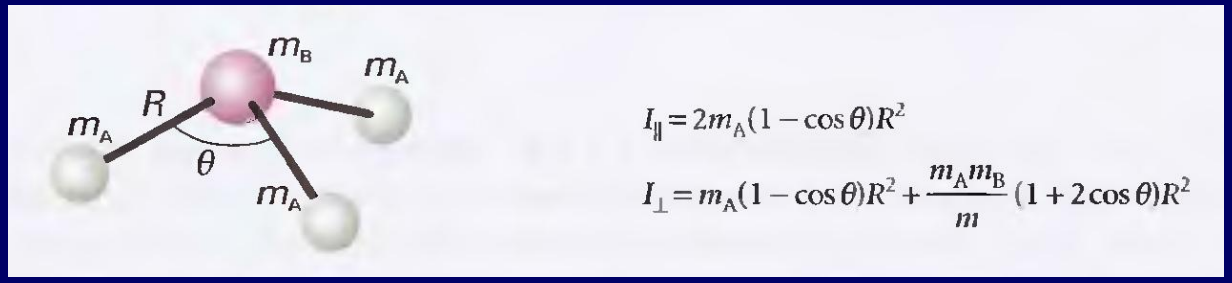
$$A = \frac{\hbar}{4\pi c I_{\square}} \qquad B = \frac{\hbar}{4\pi c I_{\perp}}$$

$K = 0, \pm 1, \ldots, \pm J$

Παράδειγμα

Να υπολογιστούν τα περιστροφικά ενεργειακά επίπεδα του μορίου της αμμωνίας. Το μήκος δεσμού N-H είναι 101,2 pm και η γωνία HNH είναι 106,7°.





$$I_{\parallel} = 4,4128\times10^{-47}\,kg\,m^2$$

$$I_{\perp} = 2,8059\times10^{-47}\,kg\,m^2$$

$$F(J,K) = BJ(J+1) + (A-B)K^2$$

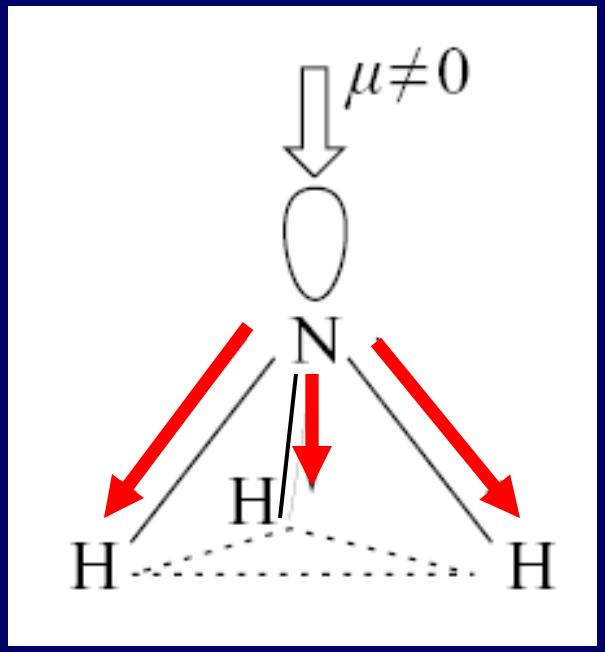
όπου $J = 0, 1, 2, \ldots$

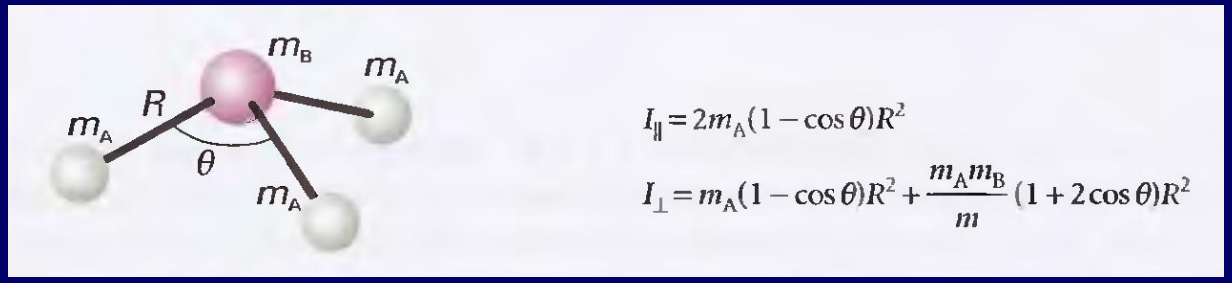
$K = 0, \pm1, \ldots, \pm J$

$$A = \frac{\hbar}{4\pi c I_{\parallel}} \qquad B = \frac{\hbar}{4\pi c I_{\perp}}$$

Παράδειγμα

Να υπολογιστούν τα περιστροφικά ενεργειακά επίπεδα του μορίου της αμμωνίας. Το μήκος δεσμού N-H είναι 101,2 pm και η γωνία HNH είναι 106,7°.





$$I_{\parallel} = 4,4128 \times 10^{-47}\, kg\, m^2$$

$$I_{\perp} = 2,8059 \times 10^{-47}\, kg\, m^2$$

$$F(J,K)/cm^{-1} = 9.977J(J+1) - 3.633K^2$$

όπου $J = 0, 1, 2, \ldots$

$K = 0, \pm 1, \ldots, \pm J$

$$A = 6,344\, cm^{-1} \qquad B = 9,977\, cm^{-1}$$

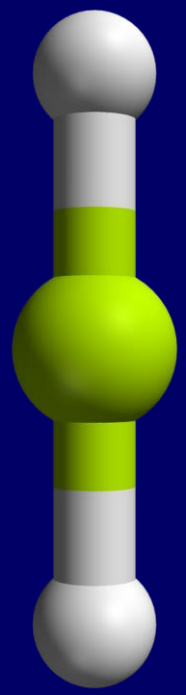
Πολυατομικά μόρια – Γραμμικοί στροφείς

Στα γραμμικά μόρια, τα άτομα βρίσκονται σε ευθεία γραμμή. Δύο από τις ροπές αδράνειας είναι ίσες μεταξύ τους, ενώ η τρίτη είναι ίση με μηδέν:

$$I_a \neq I_b = I_c, \qquad I_a = 0$$

π.χ. ακετυλένιο (HC≡CH), υδροκυάνιο (H≡CN), διοξείδιο του άνθρακα (CO_2).

Image.url



$$F(J,K) = BJ(J+1) + (A-B)K^2$$

όπου $J = 0, 1, 2, \ldots$

$K = 0, \pm 1, \ldots, \pm J$

$$A = \frac{\hbar}{4\pi c I_{\square}} \qquad B = \frac{\hbar}{4\pi c I_{\perp}}$$

$K \equiv 0$

Η περιστροφή γίνεται γύρω από τον κάθετο στο μόριο άξονα.

Η συνιστώσα στον άξονα σχήματος είναι ίση με μηδέν.

$$F(J,K) = BJ(J+1)$$

όπου $J = 0, 1, 2, \ldots$

Γραμμικό τριατομικό μόριο – μήκος δεσμού

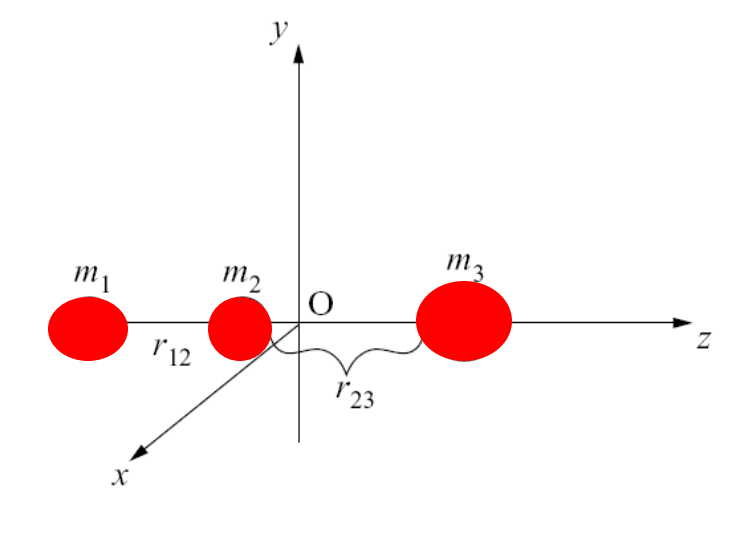
Να προσδιοριστούν τα μήκη των δεσμών O=C και C=S του τριατομικού, γραμμικού μορίου $^{16}O=^{12}C=^{32}S$ από τα εξής δεδομένα:

Σταθερά περιστροφής: B= 0,2028 cm^{-1}

Ατομικές μάζες: m(^{16}O)= 15,9949 amu
m(^{12}C)= 12,0000 amu
m(^{32}S)= 31,9721 amu

Για γραμμικό τριατομικό μόριο, η ροπή αδράνειας υπολογίζεται από την εξίσωση:

$$I = m_1 r_{12}^2 + m_3 r_{23}^2 - \frac{(m_1 r_{12} - m_3 r_{23})^2}{m_1 + m_2 + m_3}$$



Γραμμικό τριατομικό μόριο – μήκος δεσμού

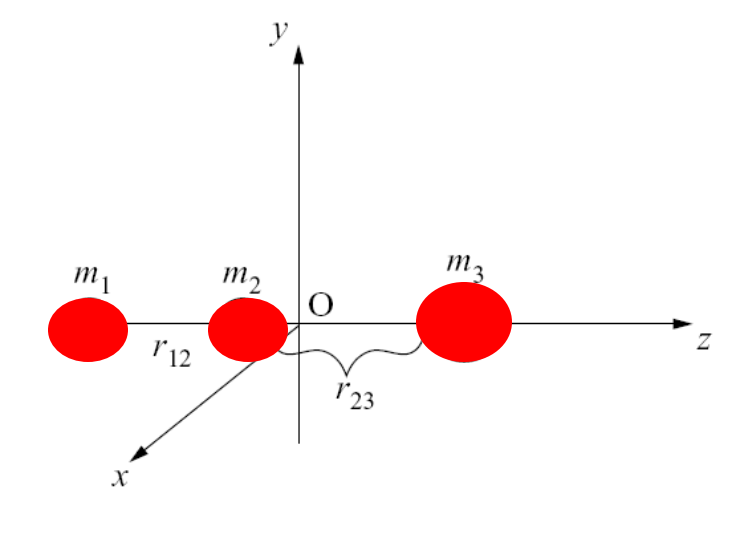
Να προσδιοριστούν τα μήκη των δεσμών O=C και C=S του τριατομικού, γραμμικού μορίου $^{16}O=^{12}C=^{32}S$ από τα εξής δεδομένα:

Σταθερά περιστροφής: B= 0,2028 cm^{-1}

Ατομικές μάζες: m(^{16}O)= 15,9949 amu
m(^{12}C)= 12,0000 amu
m(^{32}S)= 31,9721 amu

$$I = \frac{h}{8\pi^2 cB}$$

$$I = m_1 r_{12}^2 + m_3 r_{23}^2 - \frac{(m_1 r_{12} - m_3 r_{23})^2}{m_1 + m_2 + m_3}$$



Η εξίσωση περιέχει δύο αγνώστους (r_{12} και r_{23}) και για το λόγο αυτό δε μπορεί να επιλυθεί.

Γραμμικό τριατομικό μόριο – μήκος δεσμού

Τα μήκη των δεσμών μπορούν να υπολογιστούν με χρήση του ισοτοπικού φαινομένου. Ακολουθούμε τη γνωστή διαδικασία με χρήση μορίου στο οποίο αντικαθιστούμε το άτομο κάποιου στοιχείου με ένα ισότοπό του.

$^{16}O = {}^{12}C = {}^{32}S$

$^{16}O = {}^{12}C = {}^{34}S$

- **Αλλάζει η ροπή αδράνειας**
- **Αλλάζει η σταθερά περιστροφής *B***
- **Δεν αλλάζουν τα μήκη των δεσμών**

$$I = \frac{h}{8\pi^2 cB}$$

$$I = m_1 r_{12}^2 + m_3 r_{23}^2 - \frac{(m_1 r_{12} - m_3 r_{23})^2}{m_1 + m_2 + m_3}$$

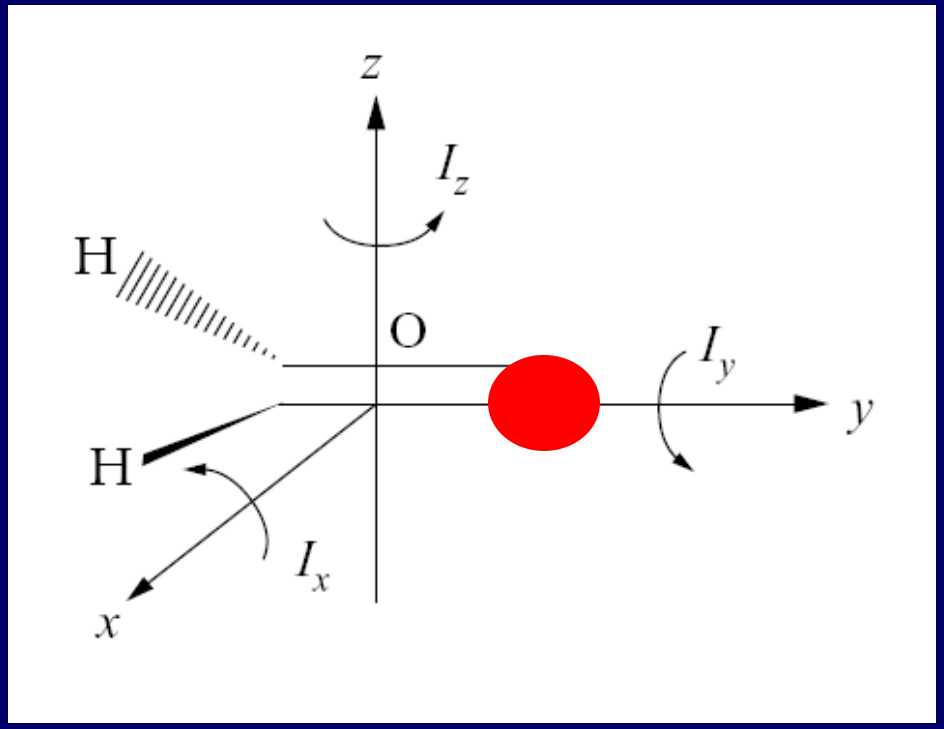
Από το φάσμα του ισοτοπικού μορίου υπολογίζουμε τη σταθερά $B_{ισοτ}$. Από τις δύο εξισώσεις με δύο αγνώστους υπολογίζουμε τα μήκη r_{12} και r_{23}.

Πολυατομικά μόρια – Ασύμμετροι στροφείς

Οι τρεις ροπές αδράνειας είναι διαφορετικές μεταξύ τους

$$I_x \neq I_y \neq I_z \neq 0$$

π.χ. φορμαλδεϋδη (H_2CO), νερό (H_2O), μεθανόλη (CH_3OH).



Άξονες περιστροφής και ροπές αδράνειας της φορμαλδεϋδης (H_2CO).

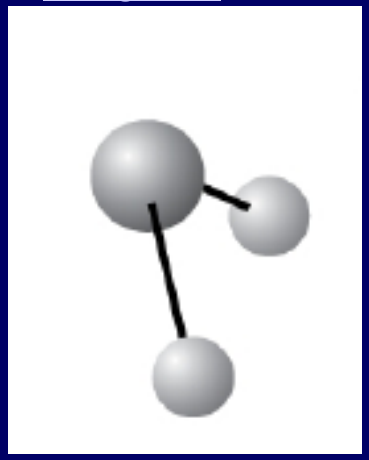
Πολυατομικά μόρια – Ασύμμετροι στροφείς

Οι τρεις ροπές αδράνειας είναι διαφορετικές μεταξύ τους

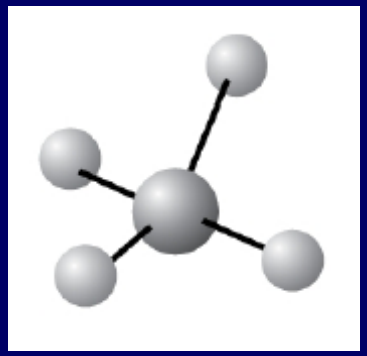
$$I_x \neq I_y \neq I_z \neq 0$$

π.χ. φορμαλδεϋδη (H_2CO), νερό (H_2O), μεθανόλη (CH_3OH).

Image.url

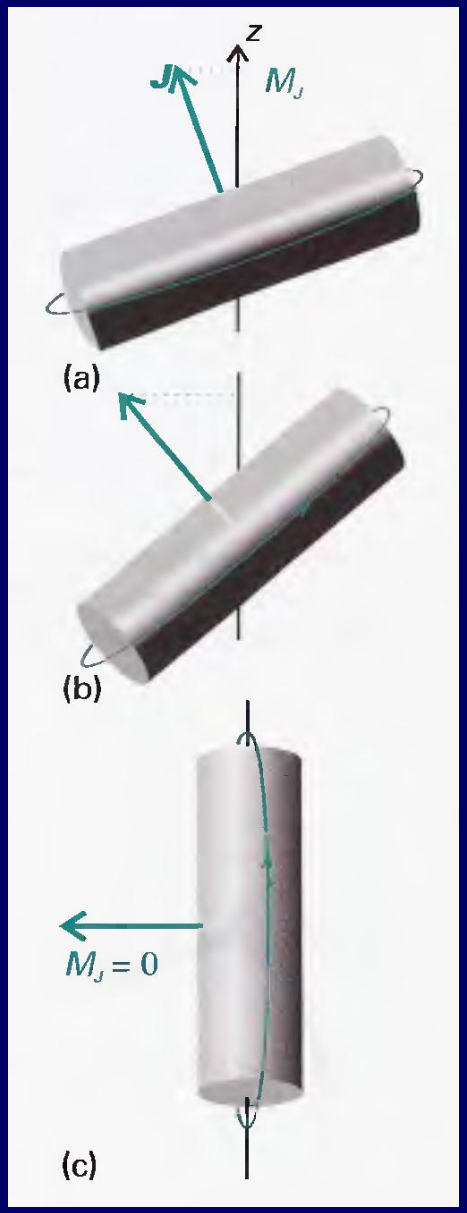


Στην περίπτωση απουσίας συμμετρίας στο πολυατομικό μόριο, η πολυπλοκότητα της θεωρίας οδηγεί στην προσεγγιστική ερμηνεία του φάσματος περιστροφής και βέβαια σε μια σχετική ανακρίβεια στον προσδιορισμό της γεωμετρίας του μορίου.



Εκφυλισμός και το φαινόμενο Stark

Εικόνα5



Η ενέργεια ενός συμμετρικού στροφέα εξαρτάται από τα J και K και όλα τα επίπεδα, εκτός από εκείνα με K=0, είναι διπλά εκφυλισμένα, γιατί οι καταστάσεις "K" και "$-K$" έχουν την ίδια ενέργεια.

Η στροφορμή ενός μορίου σε έναν άξονα αναφοράς (άξονας του μορίου) είναι κβαντωμένη και οι επιτρεπόμενες τιμές της είναι:

$M_J\hbar$ με $M_J = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm J$

Οι τιμές αυτές είναι $2J+1$ στο σύνολό τους

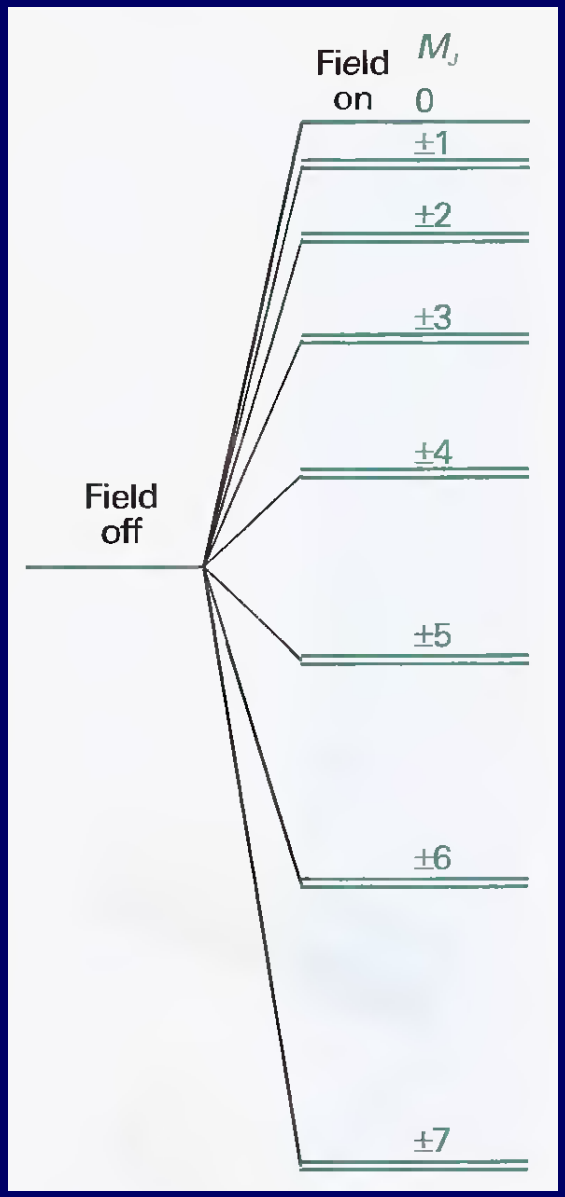
Επομένως, ένα ενεργειακό επίπεδο ενός συμμετρικού στροφέα έχει εκφυλισμό τάξης:

$2(2J+1)$ για $K \neq 0$

$2J+1$ για $K = 0$

Εκφυλισμός και το φαινόμενο Stark

Εικόνα6



Επομένως, ένα ενεργειακό επίπεδο ενός συμμετρικού στροφέα έχει εκφυλισμό τάξης:

$$2(2J+1) \quad \text{για} \quad K \neq 0$$

$$2J+1 \quad \text{για} \quad K = 0$$

Ο εκφυλισμός αυτός αίρεται εν μέρει όταν σε ένα πολικό μόριο (π.χ. HCl, NH_3) εφαρμοστεί εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο, ε.

Αυτός ο διαχωρισμός των καταστάσεων ονομάζεται φαινόμενο Stark και μπορεί να εφαρμοστεί για τη μέτρηση της διπολικής ροπής ενός μορίου.

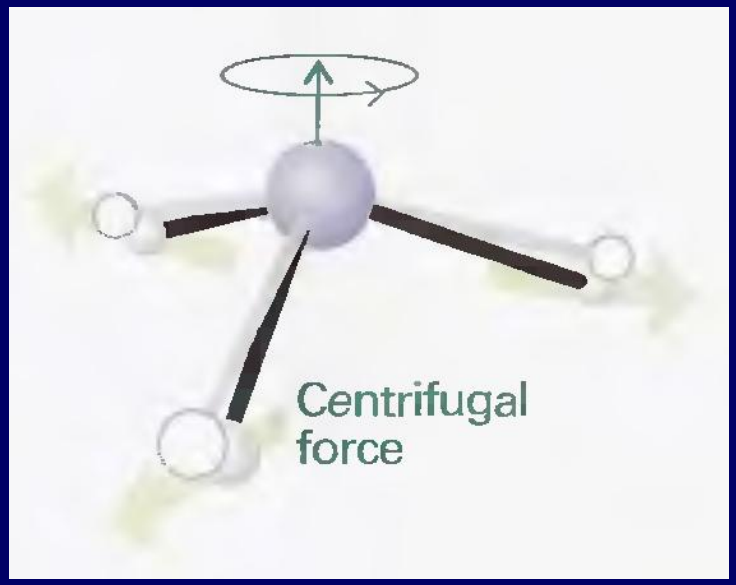
$$E = hcBJ(J+1) + \frac{\mu^2\varepsilon^2\left\{J(J+1) - 3M_J^2\right\}}{2hcBJ(J+1)(2J-1)(2J+3)}$$

Φυγόκεντρη παραμόρφωση

Στην πραγματικότητα, τα μόρια δεν είναι «άκαμπτοι στροφείς» αλλά υπόκεινται σε παραμορφώσεις που προκύπτουν από την ύπαρξη φυγόκεντρων δυνάμεων.

Η φυγόκεντρη παραμόρφωση οδηγεί σε αύξηση του μήκους του δεσμού και, επομένως, σε αύξηση της ροπής αδράνειας και σε μείωση της σταθεράς περιστροφής, B.

Προκειμένου να ληφθεί υπόψη η μείωση της απόστασης μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων, αφαιρείται (εμπειρικά) ένας όρος από την ενέργεια.



Για ένα διατομικό μόριο, η σταθερά φυγόκεντρης παραμόρφωσης, D_J, σχετίζεται με τον κυματαριθμό δόνησης του δεσμού :

$$F(J) = BJ\left(J+1\right) - D_J J^2 (J+1)^2$$

$$D_J = \frac{4B^3}{\nu^2}$$

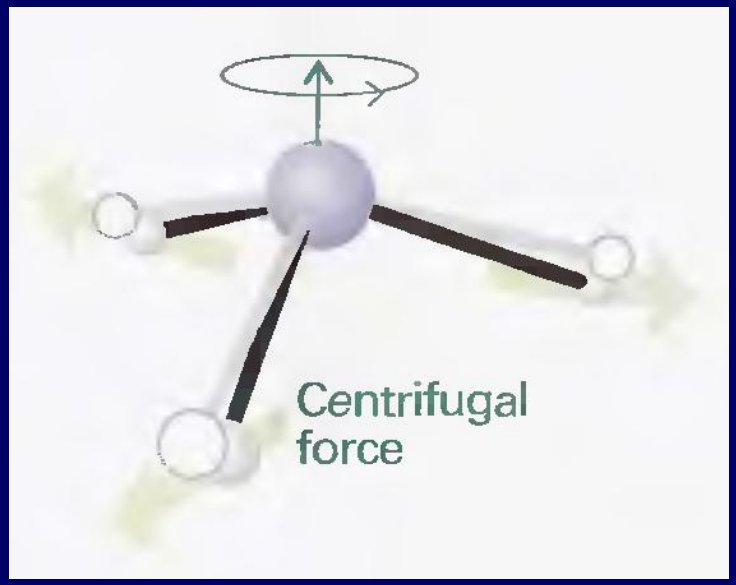
Φυγόκεντρη παραμόρφωση

Εκτός από τις μεταβολές στα περιστροφικά ενεργειακά επίπεδα, η φυγόκεντρη παραμόρφωση μπορεί να οδηγήσει σε εμφάνιση διπολικής ροπής σε μόρια, τα οποία κανονικά δεν αναμένεται να έχουν.

Για παράδειγμα, το μόριο SiH_4 (σφαιρικός στροφέας) παραμορφώνεται αρκετά ώστε να αποκτά διπολική ροπή περίπου 8.3 μD όταν περιστρέφεται με J= 10.

Για σύγκριση, το HCl έχει μόνιμη διπολική ροπή ίση με 1.1 D.

Εικόνα7

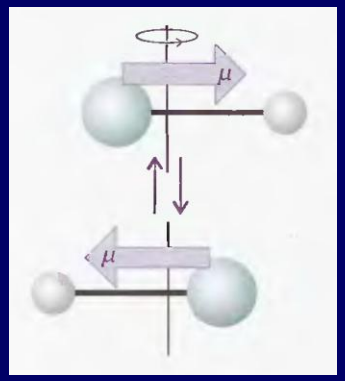


Η λήψη αμιγώς περιστροφικού φάσματος για το SiH_4 είναι δυνατή σε υψηλές πιέσεις (4 atm) και χρήση κυψελίδας με μεγάλο μήκος διαδρομής (10 m).

$$1D = 3.33564 \times 10^{-30}\,\mathrm{C\,m}$$

Σύνοψη - Περιστροφικοί κανόνες επιλογής

Εικόνα8



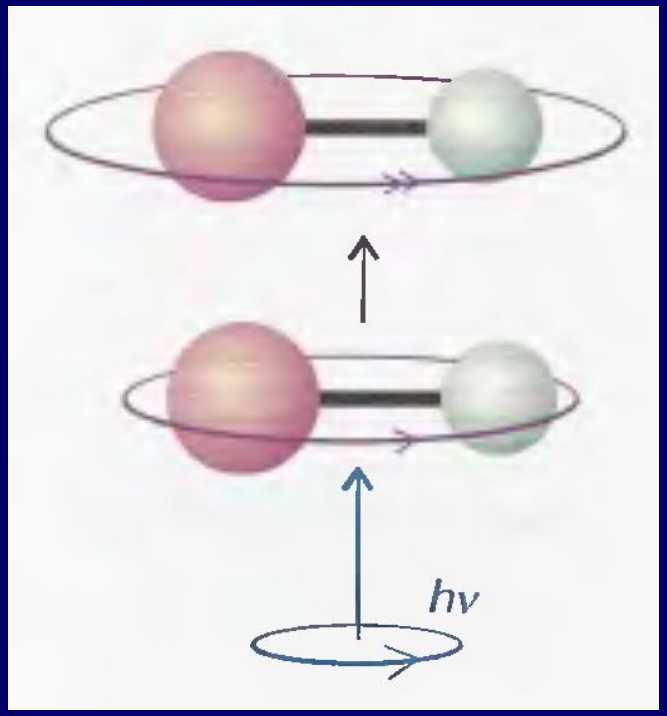
ΓΕΝΙΚΟΣ ΚΑΝΟΝΑΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ

Για να δώσει ένα μόριο αμιγώς περιστροφικό φάσμα πρέπει να είναι πολικό …

… ή να αποκτά πολικότητα κατά την περιστροφή του ως αποτέλεσμα της φυγόκεντρης παραμόρφωσης

ΕΙΔΙΚΟΙ ΚΑΝΟΝΕΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ

Εικόνα9



Γραμμικά μόρια: $\Delta J = \pm 1$

$\Delta M_J = 0, \pm 1$

Η επιτρεπόμενη μεταβολή των J και M_J προκύπτει από τη διατήρηση της στροφορμής όταν ένα φωτόνιο με σπιν 1 εκπέμπεται ή απορροφάται.

Αν το μόριο περιστρέφεται με τρόπο που αντιστοιχεί στο σπιν του προσπίπτοντος φωτονίου, τότε το J αυξάνει κατά 1

Σύνοψη - Περιστροφικοί κανόνες επιλογής

Όταν η ροπή μετάβασης υπολογιστεί για όλους τους δυνατούς προσανατολισμούς του μορίου, σε σχέση με τη διεύθυνση του φωτονίου, υπολογίζεται ότι η ολική ένταση της μετάβασης $J+1 \leftrightarrow J$ είναι:

$$\left|\mu_{J+1,J}\right|^2 = \mu^2 \times \frac{J+1}{2J+1} \rightarrow \left|\mu_{J+1,J}\right|^2 \approx \frac{1}{2}\mu^2 \quad \text{για } J >> 1$$

Παρόλο που η ένταση της γραμμής εξαρτάται από το J, η εξάρτηση είναι ασθενής και την κύρια επίδραση στις εντάσεις έχουν οι πληθυσμοί των καταστάσεων.

Για τους συμμετρικούς στροφείς απαιτείται ένας κανόνας επιλογής για το K.

ΕΙΔΙΚΟΙ ΚΑΝΟΝΕΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ

Γραμμικά μόρια: $\Delta J = \pm 1$

$\Delta M_J = 0, \pm 1$

Συμμετρικοί στροφείς: $\Delta K = 0$

Σύνοψη - Μορφή περιστροφικών φασμάτων

Εφαρμογή των κανόνων επιλογής στα ενεργειακά επίπεδα ενός άκαμπτου στροφέα δείχνει ότι οι κυαταριθμοί των επιτρεπτών μεταβάσεων απορρόφησης, $J+1 \leftarrow J$, είναι:

$$\nu = 2B(J+1) \qquad J = 0, 1, 2, \ldots$$

Το φάσμα αποτελείται από μια ακολουθία γραμμών με κυματαριθμούς $2B$, $4B$, $6B$, … και, επομένως, απόσταση $2B$ μεταξύ τους.

Το επίπεδο με τον μέγιστο πληθυσμό σε γραμμικό μόριο αντιστοιχεί σε J ίσο με

$$J_{\max} = \left(\frac{kT}{2hcB}\right)^{1/2} - \frac{1}{2}$$

Η τιμή του J που αντιστοιχεί στην πιο έντονη γραμμή δεν είναι αυτή του $J_{\max}$, γιατί η παρατηρούμενη απορρόφηση περιλαμβάνει την εξαναγκασμένη εκπομπή.

Εφαρμογές της φασματοσκοπίας περιστροφής

1. **Ποιοτική ανάλυση**. Από το φάσμα περιστροφής μπορεί να ταυτοποιηθεί μια ουσία σε ένα δείγμα.

2. **Ποσοτική ανάλυση**. Η ένταση των κορυφών στο φάσμα είναι απ'ευθείας ανάλογη με τη συγκέντρωση της ουσίας στο δείγμα.

Με τη φασματοσκοπία μικροκυμάτων

* δεν είναι δυνατή η ανίχνευση χαρακτηριστικών ομάδων σε ένα δείγμα
* μπορεί να ανιχνευθεί η παρουσία ισοτόπων

Μια σημαντική εφαρμογή της φασματοσκοπίας μικροκυμάτων είναι η ανίχνευση και ανάλυση χημικών ουσιών στο διάστημα.

Με τον τρόπο αυτό έχουν ανιχνευθεί περισσότερα από 80 διατομικά και πολυατομικά μόρια στους γαλαξίες και το διαστρικό χώρο.

Αναφορές

Οι εικόνες 1,4,5,6,7,8,9 είναι από το βιβλίο
ATKINS, ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ, P.W. Atkins, J. De Paula
(Atkins' Physical Chemistry, 9th Edition, 2010)
Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2014

Οι εικόνες 2,3 είναι από το βιβλίο
ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ, Φ. Νταής
Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Πάτρα, 2001.

Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Ιστορικού εκδόσεων έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση 1.0.0.

Σημείωμα αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών. Αναπληρωτής Καθηγητής, Δημήτρης Κονταρίδης. «Μοριακή Φασματοσκοπία». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2015.

Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:
https://eclass.upatras.gr/courses/CMNG2173/

Σημείωμα αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Μη Εμπορική Χρήση Παρόμοια Διανομή 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».

[1] http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/

Ως **Μη Εμπορική** ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου, για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό όφελος (π.χ. διαφημίσεις) από την προβολή του έργου σε διαδικτυακό τόπο

Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.