

Η ένταση της απορροφίως εξαρτάται
 από την εμφανιζόμενη πολικότητα
 κατά τη διάρκεια της διεκέρσεως και
αίφνηται μ' αυτή

Εννοια δουληρώματος μεταβατικής ροής: P_{mn}
↑ πλήρης κυματοσυνάρτηση δευτερεύουσας καταστάσεως
→ άνωμα διπολικής ροής.

$$P_{mn} = \int \Psi_m \vec{P} \Psi_n dv$$

↓ πλήρης συνάρτηση διατεταγμένης καταστάσεως

εμφάνιση κατά προέγερση τη μεταβολή της
 διπολικής ροής κατά τη διεκέρση.

Εννοια: ισχύς ταλαντώσεως F

$$F = K P_{mn}^2 \approx 4.32 \cdot 10^9 \epsilon \Delta \bar{\nu}$$

↓
σταθερά

εξήγηση των έντασε
απορροφίως.

μοριακός συντελεστής!
 απορροφίως!

διαφορά συχνότητας ($\epsilon \bar{\nu}$)
 επί μισό του ύψους ελκ
 καμπύλης απορροφίως!

ΚΑΝΟΝΕΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ

$P_{mn} = 0$ απαγορευμένη διεύρεση

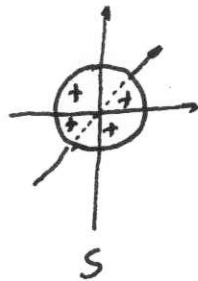
$P_{mn} \neq 0$ επιτρεπτή διεύρεση

$P_{mn} = 0$ στις διεύρεσις

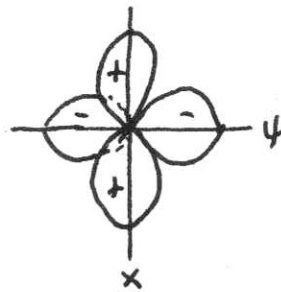
$S \rightarrow T$
$T \rightarrow S$
$n \rightarrow n^*$
$g \rightarrow g$
$u \rightarrow u$

Τα πρότυπα των κυματικών συνάρτησεων έχουν μεγάλη σημασία λόγω λαμβάνονται γνώση των επιπέδων των ορμιακών και κατά συνέπεια και δυναμική των χημικών δεσμών.

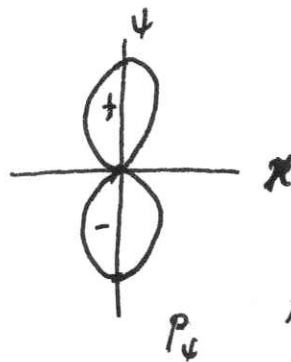
Οι $2p$ και $3d$ χρησιμοποιούνται αναφορικά με τη συμμετρία των ορμιακών και οι χαρακτηριστικές αυτές όψεις (gerade) και "αηλιττός" (ungerade). Η πρώτη σχετίζεται με την ανακρίβεια ή την κίνηση συμμετρικά (το δεύτερο πομπή των αξόνων x, y, z).



ορμιακό gerade.
g



d_{xy}
ορμιακό gerade
g



ορμιακό ungerade.
u

Στις παραρτημένες έννοιες, όπως από
 τη Πηγή (α) $\epsilon \rightarrow \epsilon^*$ και $\pi \rightarrow \pi^*$ Σχεδίαση
 και μία άλλη δίσταση, με ορισμένη ένταση
 η $\epsilon \rightarrow \pi^*$ θα οφείλονται και ανύψωση ενός
 ορισμένου η π (υψηλότερη και π^* ορι-
 στική κατάσταση

$$\epsilon \rightarrow \pi^* \quad \xrightarrow{h\nu} \quad \pi \rightarrow \pi^*$$

Η δίσταση αυτή είναι Απαγορευμένη, επειδή τα η
 υψηλότερα βρίσκονται σε κάποιο επίπεδο ΓΕ
 κάτω με τα η υψηλότερα, και πραγματοποιείται
 στην ύψωση με ορισμένη ένταση με
 $\lambda = 280nm$.

οι διηγήσεις $y \rightarrow y$ και $u \rightarrow u$ είναι αναφορ-
μένης τήτης έχω τὴν ἴση πυκνότητα, οὖτε

$$\rho_{mu} = 0$$

Ἀναφορμένης τὴς τήτης οἱ διηγήσεις μετ' ἀλλο-
θι εἶναι, $S \rightarrow T$ γιατί εἶναι τὴν ἴση τὴν ἴση
εἶναι τὴν ἴση τὴν ἴση τὴν ἴση τὴν ἴση
πυκνότητα ἀναφορμένης και τὸ ρ^2 τὴν ἴση
πυκνότητα.

Εἶναι ἴση τὴν ἴση τὴν ἴση τὴν ἴση
εἶναι τὴν ἴση τὴν ἴση τὴν ἴση $u \rightarrow \pi^*$
τὴν ἴση ἀναφορμένης.

→ ευχρόστης ταλαντώσει!

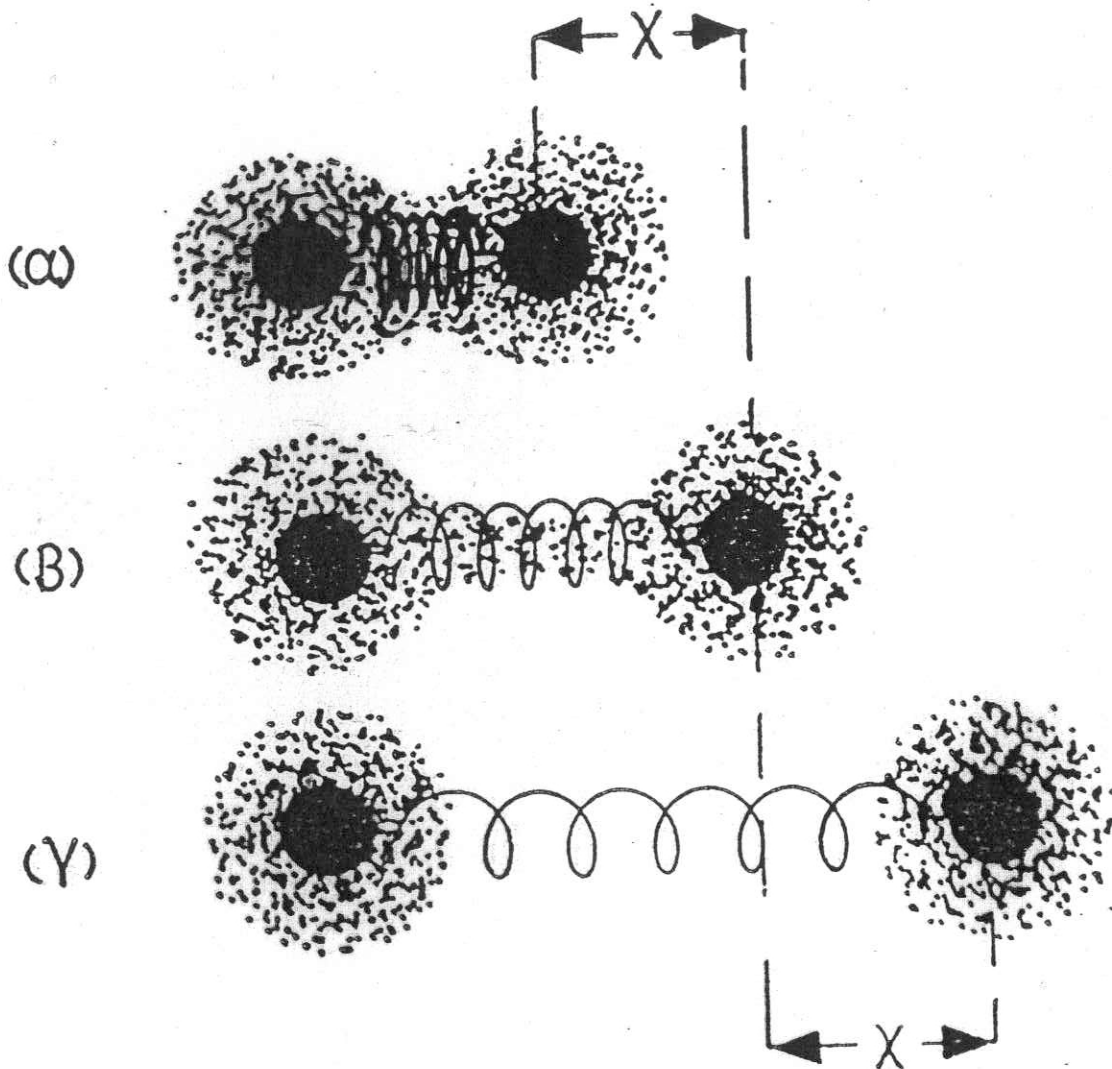
$$v = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$k =$ σταθερά ισχύος δεσμοί $\frac{\text{dyn}}{\text{cm}}$

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$



Ο χημικός δεσμός παρομοιάζεται έντοτε προς ελατήριο. Τα συνδεδεμένα άτομα εύρισκονται εις συνεχή παλμική κίνηση. Η θέση (β) είναι η λεγομένη θέση ισορροπίας.

↙ αρμονικός ταλαντωτής!

ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΔΟΝΗΣΕΩΣ

Για δύο άτομα A, B που ενδέονται με δεσμό A-B

$$E_{\Delta} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{\kappa}{\mu}}$$

v = κβαντικός αριθμός δόνησης : 0, 1, 2, 3, ...

κ = σταθερά δύναμης χημικού δεσμού.

μ = ανηγμένη μάζα $\left\{ \mu = \frac{m_A \cdot m_B}{m_A + m_B} \right\}$

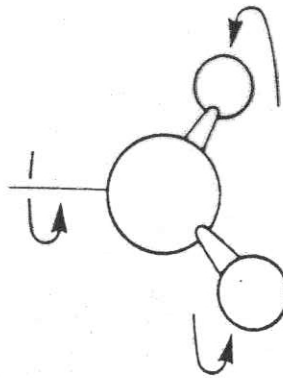
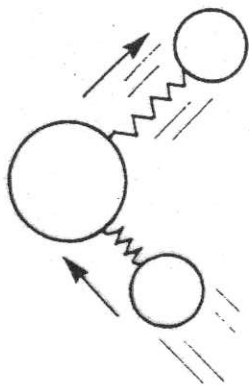
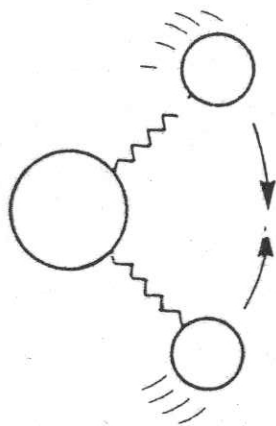
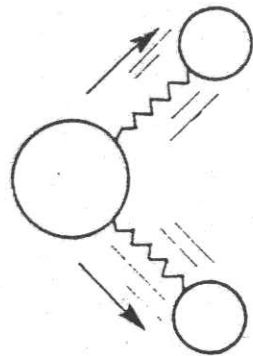
ΚΑΝΟΝΑΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ: $\Delta v = \pm 1$

π.χ. $E_{\Delta 0} \rightarrow E_{\Delta 1}$, $E_{\Delta 1} - E_{\Delta 0} = h\nu$

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\kappa}{\mu}}$$

Επειδή $\nu = \frac{c}{\lambda}$ και $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \Rightarrow \nu = c\tilde{\nu}$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{\kappa}{\mu}}$$



Ένα μόριο για να απορροφήσει υπέρυθη ακτινοβολία θα πρέπει:

Η διπολική ροπή του μορίου να μεταβάλλεται κατά τη διάρκεια της δόνησής

Δύο μεγαλύτερη είναι η μεταβολή της διπολικής ροπής τόσο ισχυρότερη είναι η απορρόφηση.

Ο θεωρητικός αριθμός των βαθικών δονήσεων ενός μορίου είναι συνάρτηση των: αριθμών των ατόμων και της γεωμετρίας του.

Μη γραμμικό μόριο με N άτομα έχει τη δυνατότητα $3N-6$ δονήσεων.

π.χ. $H_2O \Rightarrow 3 \times 3 - 6 = 3$ δυνατές δονήσεις.

Γραμμικό μόριο με N άτομα οι δυνατές δονήσεις είναι $3N-5$

π.χ. $CO_2 \Rightarrow 3 \times 3 - 5 = 4$ δυνατές δονήσεις

π.χ. $H_2 \Rightarrow 3 \times 2 - 5 = 1$ δυνατή δόνηση.

$$H_2 \quad (n=2) \Rightarrow 3 \times 2 - 5 = 1 \text{ δόνηση.}$$



Όχι μεταβολή διπολικής ροπής

\Rightarrow Όχι ταινία απορρόφησης στο IR.

$$CO_2 \quad (n=3) \Rightarrow 3 \times 3 - 5 = 4 \text{ δόνησεις.}$$



συμμετρική
Έκταση



ασύμμετρον
Έκταση

✓ IR



δόνηση
κάμψης
Επίπεδο χάρτου

Εκφυλισμένη
δόνηση



δόνηση κάμψης

\oplus ΠΑΝΩ από επίπεδο χάρτου

\ominus ΚΑΤΩ από επίπεδο χάρτου.

✓ IR

Όχι μεταβολή
Διπολικής
ροπής
 \Rightarrow Όχι ταινία
κπορ. στο IR