

Reforma a rozvoj výuky Biofyziky pro potřeby 21. století

Číslo výzvy: **IPo - Oblast 2.2 (výzva 15)**

Reg. č. projektu: **CZ.1.07/2.2.00/15.0215**



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



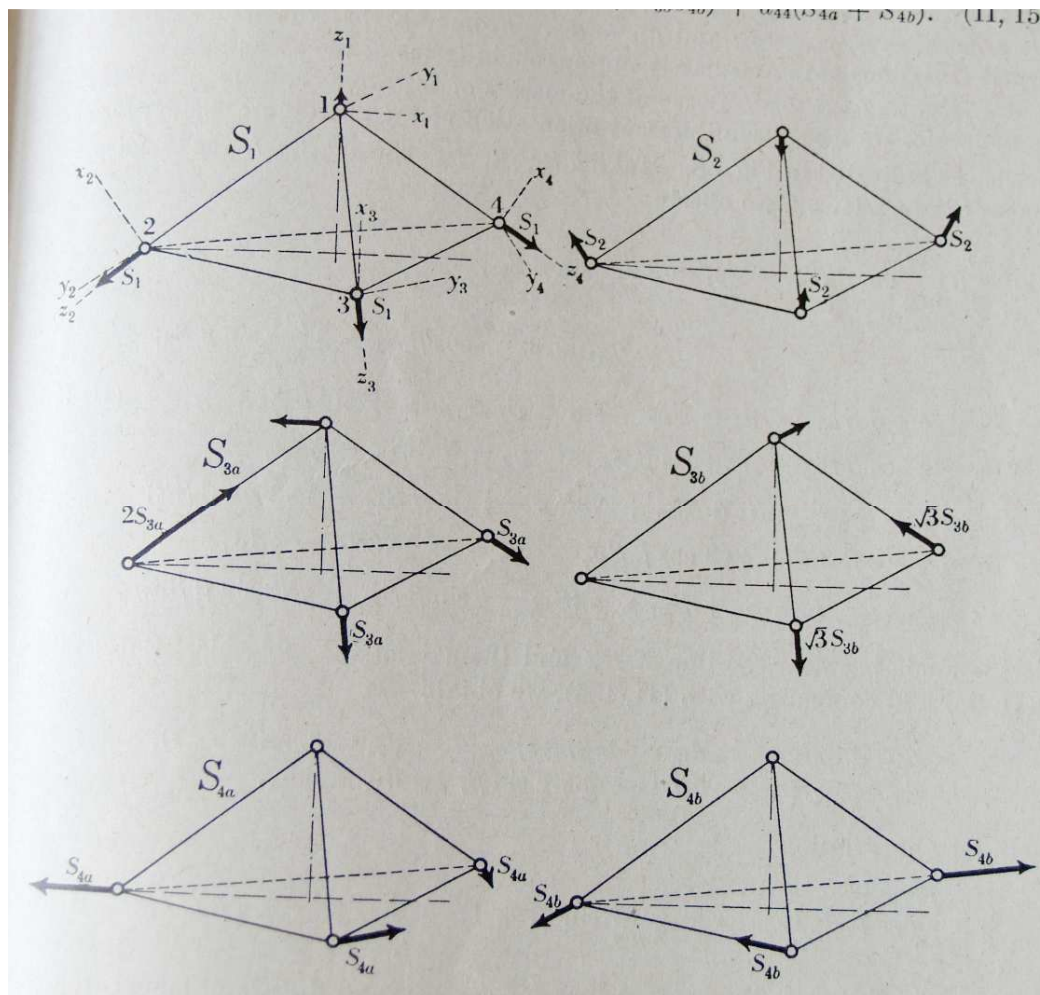
OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost



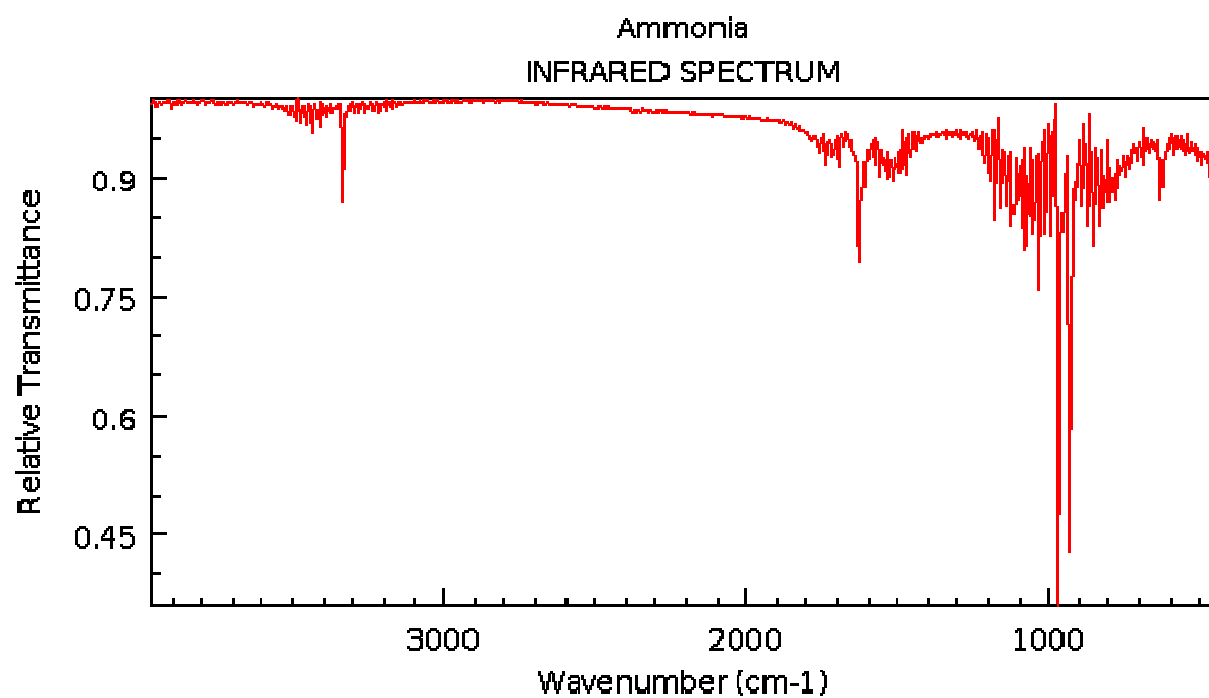
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Vibrate NH_3

$2A_1 + 2E$



vibrační frekvence: 950/cm, 1628/cm, 3337/cm, 3414/cm



NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)

molekula NH_3 je případem tzv. pyramidální molekuly XY_3

označíme-li

a_1 silovou konstantu mezi atomem X a Y,

a_2 silovou konstantu mezi dvěma atomy Y,

β úhel mezi spojnici X-Y a osou molekuly,

dostaneme v přiblížení centrálních polí pro nedegenrované vibrační módy podmínky

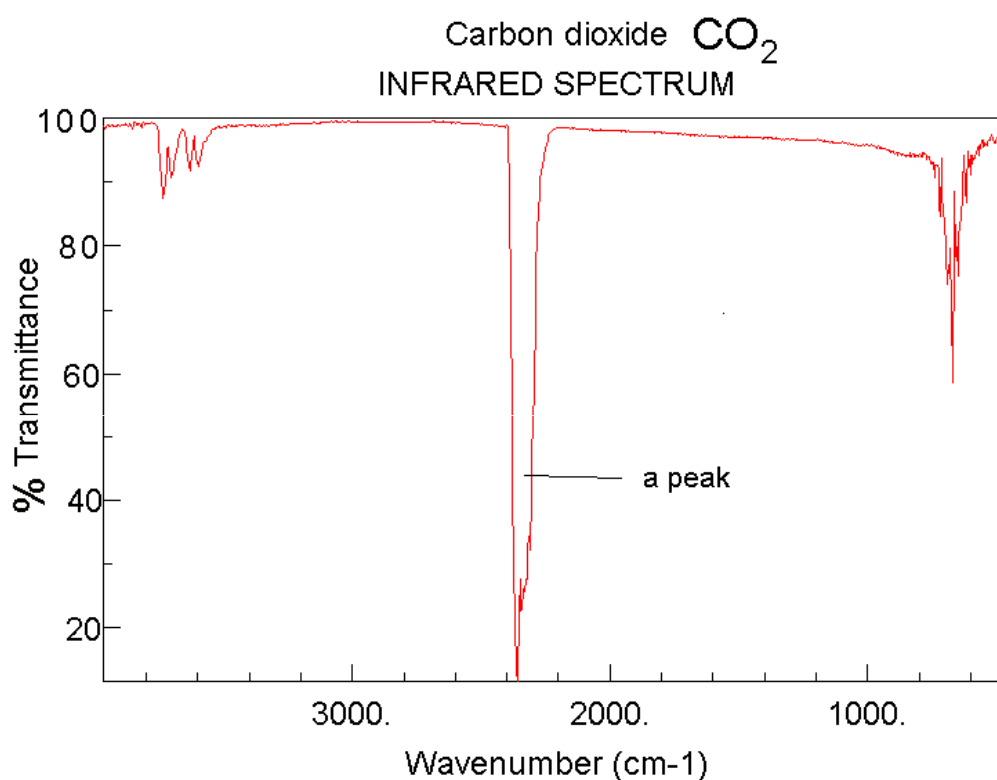
$$4\pi^2(f_1^2 + f_2^2) = \left(1 + 3\frac{m_Y}{m_X}\cos^2\beta\right)\frac{a_1}{m_Y} + 3\frac{a_2}{m_Y} \quad 16\pi^4 f_1^2 f_2^2 = 3\left(1 + 3\frac{m_Y}{m_X}\right)\cos^2\beta\frac{a_1 a_2}{m_Y^2}$$

a pro degenerované módy

$$4\pi^2(f_3^2 + f_4^2) = \left(1 + \frac{3}{2}\frac{m_Y}{m_X}\sin^2\beta\right)\frac{a_1}{m_Y} + \frac{3}{2}\frac{a_2}{m_Y} \quad 16\pi^4 f_3^2 f_4^2 = \frac{3}{4}\left(2 - \sin^2\beta + 3\frac{m_Y}{m_X}\sin^2\beta\right)\frac{a_1 a_2}{m_Y^2}$$

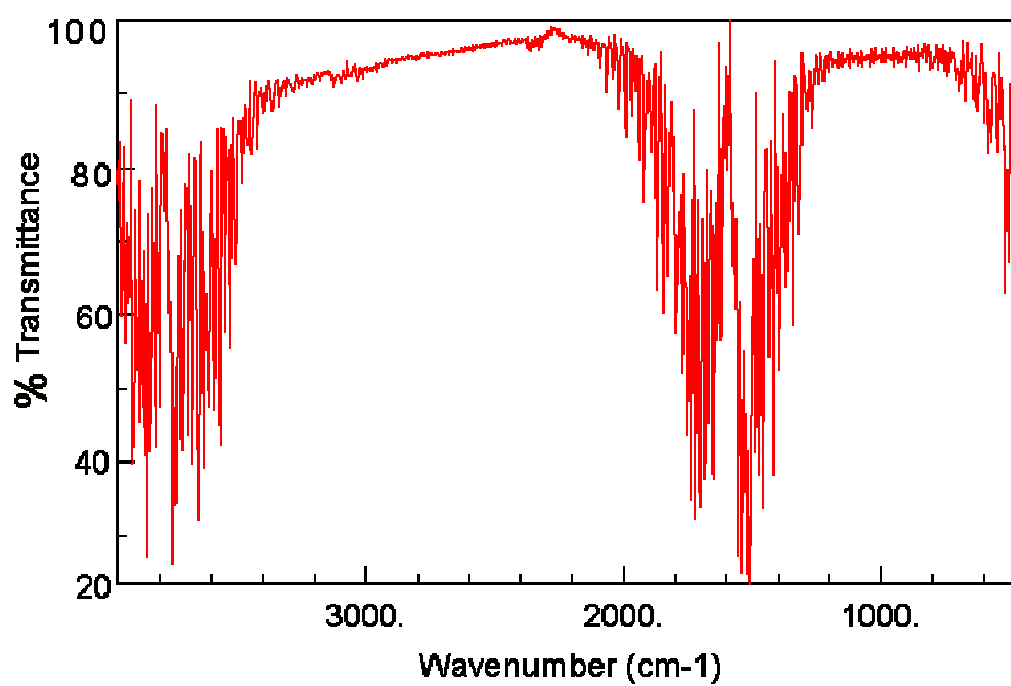
odkud například

$$\cos^2\beta = \frac{1}{4\frac{f_3^2 f_4^2}{f_1^2 f_2^2} + \frac{3m_Y - m_X}{3m_Y + m_X}}$$



NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)

Water H_2O
INFRARED SPECTRUM



NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)