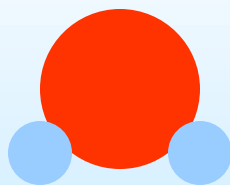
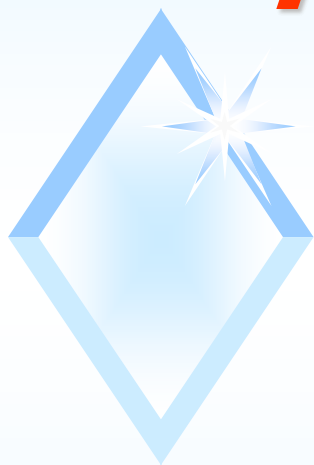


Spektroskopia oscylacyjna

W10_11

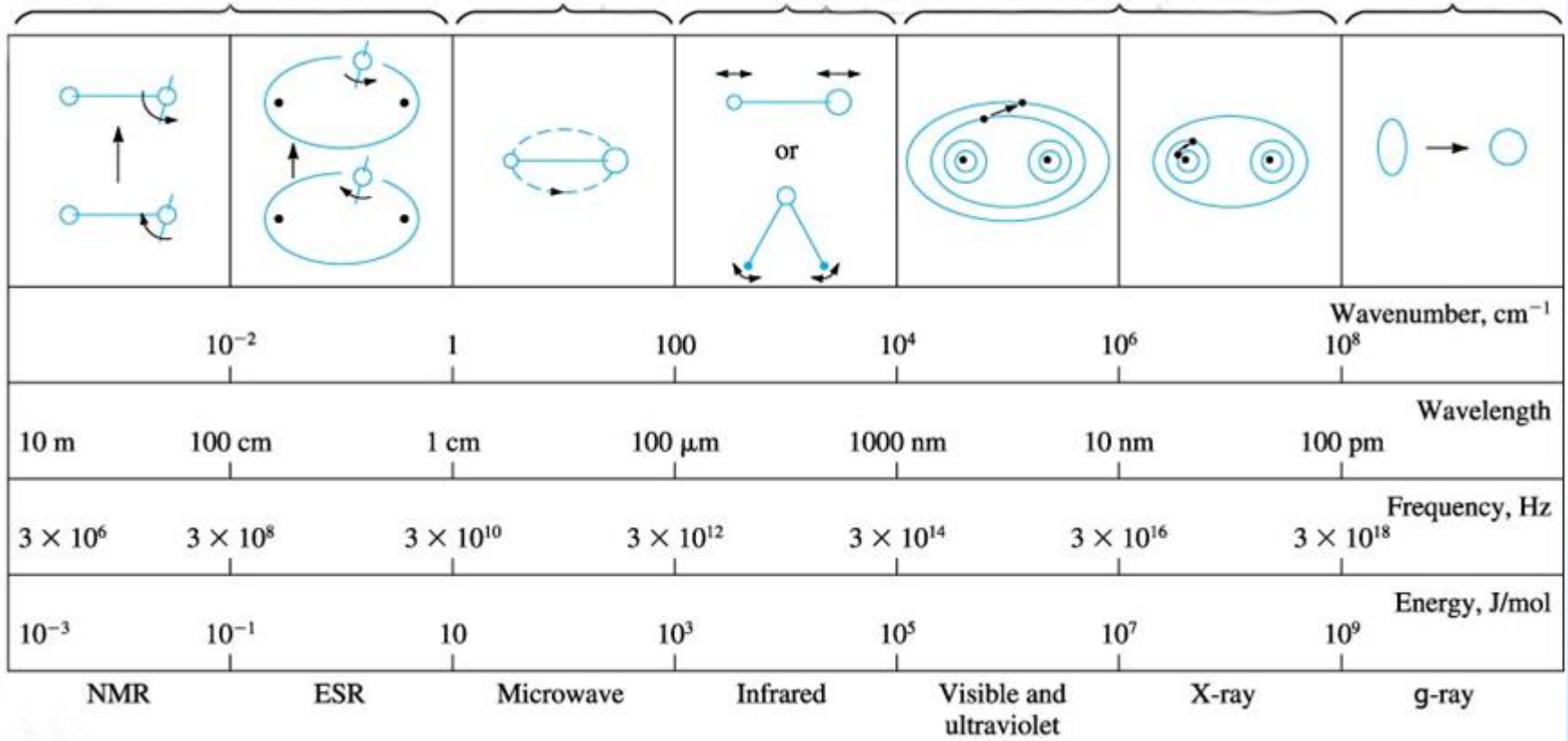
2022_23





Typ zmian kwantowych

Zmiana: spinu orientacji konfiguracji rozkładu elektronowego konfig. jądrowej

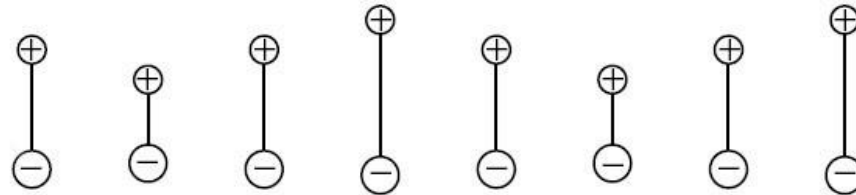


Rodzaj spektroskopii

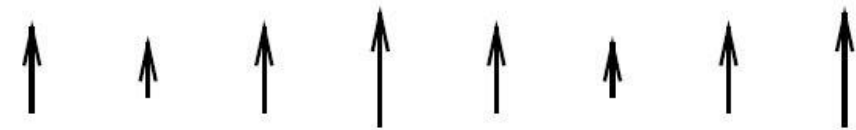


Dlaczego światło oddziałuje z drgającą cząsteczką?

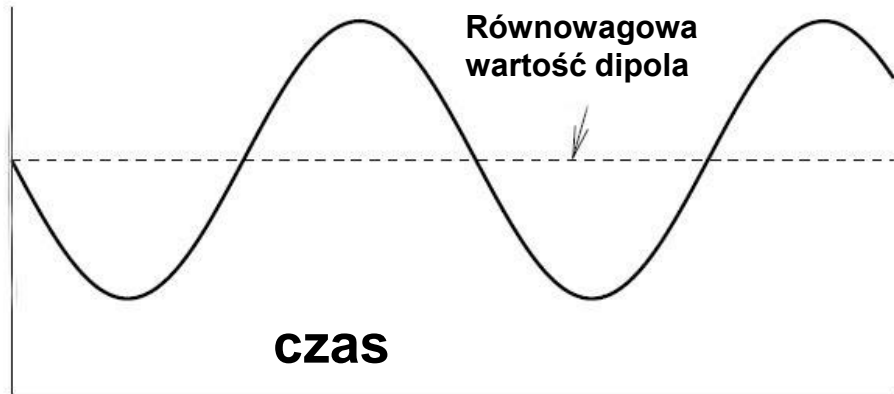
Długość wiązania



Wielkość dipola



**Pionowa
składowa dipola**



czas



Jaka jest długość fal promieniowania elektromagnetycznego wzbudzającego oscylacje atomów w cząsteczkach ?

Promieniowanie podczerwone (IR)

Długości fal **2 – 50 μm**

Liczby falowe **5000 - 200 cm^{-1}**

Częstość **10^{13} - 10^{15} s^{-1}**

Ile oscylacji na sekundę wykonują atomy jeżeli pasmo pojawia się przy 4111 cm^{-1} ?

**120 bilionów oscylacji na sekundę!!!!
Czyli 120×10^{12} oscylacji/s lub oscylacja co 8×10^{-15} sekundy!**



Zastosowanie spektroskopii w podczerwieni

- określanie długości wiązań
- wyznaczanie stałych siłowych
- wyznaczanie energii dysocjacji wiązania
- analiza jakościowa i ilościowa
- badanie oddziaływań międzycząsteczkowych



Mechanika kwantowa oscylacji w cząsteczce

Równanie Schrödingera dla cząstki o masie **m**, na którą nie działają żadne siły, poruszającej się w 1-wymiarowym pudle ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x)$$

Dozwolone energie, przy nieskończone twardych ścianach w **x=0** i **L**, przyjmują wartości

$$E_n = \frac{h^2}{8mL} n^2 \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Wykład 2 !



Mechanika kwantowa oscylacji w cząsteczce

Jakikolwiek ruch rozciągający lub zginający może być matematycznie opisany przy pomocy równania Schrödingera jako ruch 1-D pewnej „masy efektywnej” m^* o energii potencjalnej $V(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(x)$$

- Równanie różniczkowe dla cząstki w pudle jest szczególnym przypadkiem powyższego równania gdy $V(r)=0$
- Równanie to opisuje również ruch elektronu w atomie wodoru gdzie $V(r)$ jest potencjałem Coulombowskim $V(r)=-Ze^2/r$ i dozwolone energie przyjmują wartości $E_n=-Z^2R_H/n^2$

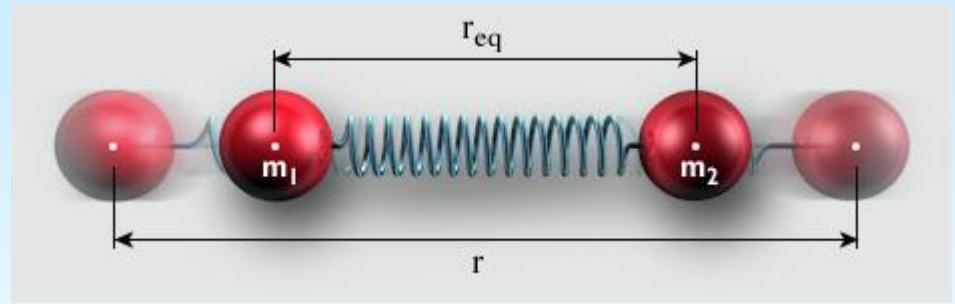


Mechanika kwantowa oscylacji w cząsteczce

- ◆ Dla cząsteczki dwuatomowej $m^* = \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$
- ◆ Dla drgań oscylacyjnych cząsteczki wieloatomowej, m^* dla każdego rodzaju ruchu zależy od mas wszystkich atomów, od struktury cząsteczki i sił rozciągających i zginających

Niestety, cząstka w pudle i potencjał Coulombowski niedokładnie opisują siły w cząsteczce działające w trakcie oscylacji wiązania. Znacznie lepszym przybliżeniem jest potencjał oscylatora harmonicznego.

Oscylator harmoniczny



$$V(r) = \frac{1}{2} k(r - r_e)^2$$

- ◆ Z fizyki klasycznej wiemy, że energia potencjalna jest wkładem do całkowitej energii wynikającym z położenia cząstek
- ◆ Dla cząstki o potencjale $V(r)$ chwilowa siła działająca na cząstkę

$$F = -\frac{dV}{dr}$$

- ◆ Dla oscylatora harmonicznego spełnione jest prawo Hooke'a

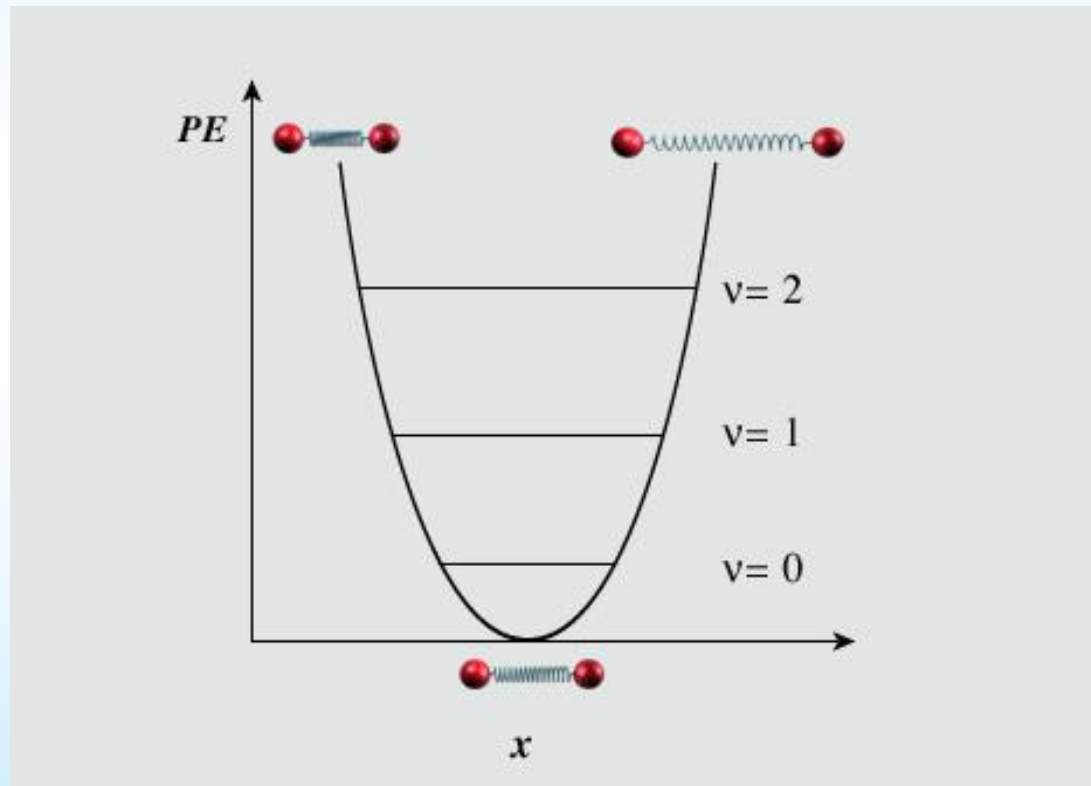
$$F = -k(r - r_e)$$

minus oznacza, że gdy $r > r_e$ siła pcha układ w kierunku przeciwnym, z powrotem do r_e

gdy $r < r_e$ dwa minusy znoszą się i siła jest dodatnia – działa w kierunku r



Oscylator harmoniczny





Oscylator harmoniczny

- ◆ Dla większości ruchów oscylacyjnych o niewielkich amplitudach, oscylator harmoniczny jest bardzo dobrym przybliżeniem
- ◆ Równanie Schrödingera ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} kx^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

$$E_\nu = h\nu_e \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \quad \nu = 0, 1, 2, 3, \dots \text{kwantowa liczba oscylacji}$$

$$\nu_e [s^{-1}] = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{Częstość drgań oscylatora spełniającego prawo Hooke'a, o stałej siłowej } k \text{ i masie zredukowanej } \mu$$

Przyjęto, że stan o najniższej energii oscylatora harmonicznego jest oznaczany kwantową liczbą oscylacji $\nu=0$, podczas gdy dla cząstki w pudle lub atomu wodoru stan o najniższej energii odpowiada liczbie $n=1$.

Przyjmując, że $n \leftrightarrow \nu + 1$, wówczas jakościowo postać funkcji falowej będzie taka sama



Oscylator harmoniczny

Spektroskopiści jako jednostki energii stosują liczby falowe [cm^{-1}]

$$E_v[\text{cm}^{-1}] = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right)$$

$$\omega_e = \frac{h\nu_e}{hc} 10^{-2} = \frac{10^{-2} h}{hc 2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{10^{-2}}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

ω_e - stała oscylacyjna



Reguły wyboru

- ◆ Przejścia oscylacyjne są dozwolone tylko wtedy gdy w czasie oscylacji cząsteczki zmienia się moment dipolowy
- ◆ Dla oscylatora harmonicznego dozwolone są przejścia $\Delta v = \pm 1$
- ◆ Dla oscylatora anharmonicznego dozwolone są przejścia $\Delta v = \pm 1$ (uprzywilejowane w temp. pokojowej)
 $\Delta v = \pm 2, \pm 3, \pm 4, \dots$
- ◆ Energie przejść wynoszą:

$$\Delta E_v = E(v+1) - E(v) = \omega_e \left[(v+1) + \frac{1}{2} \right] - \omega_e \left[v + \frac{1}{2} \right] = \omega_e$$

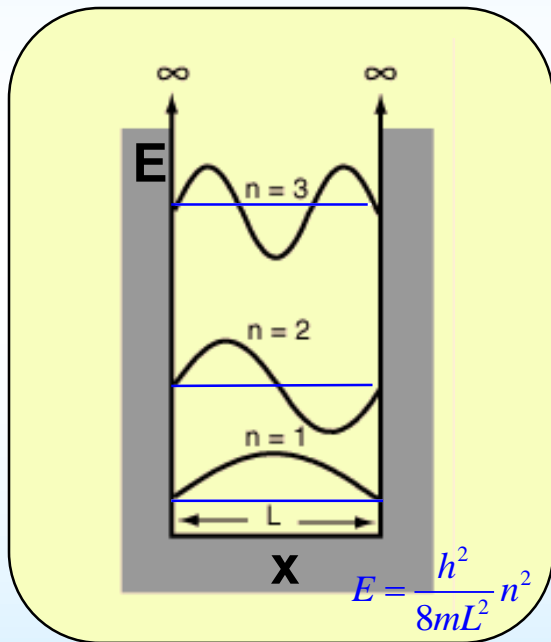
ω_e jest stałe dla wszystkich v !!!

Oznacza to, że przejścia pomiędzy dowolną parą sąsiadujących poziomów leżą dokładnie w tym samym miejscu widma.

W praktyce, dla rzeczywistych cząsteczek, anharmoniczność powoduje, że jest nieco inaczej. Wyższe poziomy energetyczne leżą bliżej siebie i stąd przejścia oscylacyjne pojawiają się przy niższych energiach

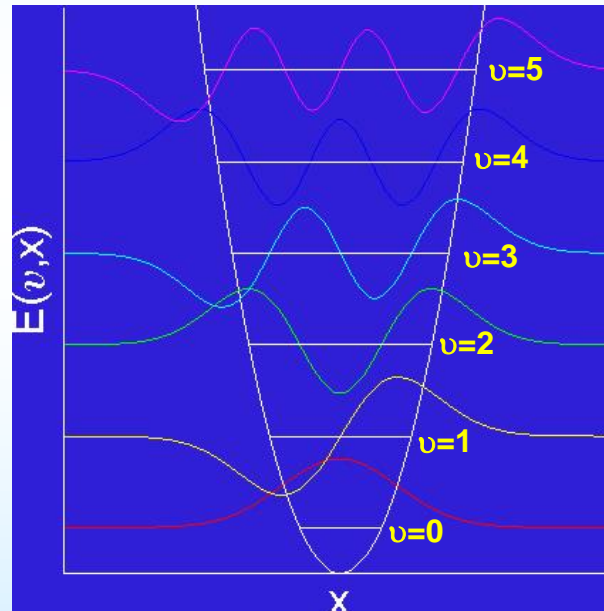
Porównanie krzywych energii potencjalnej

Studnia potencjałów

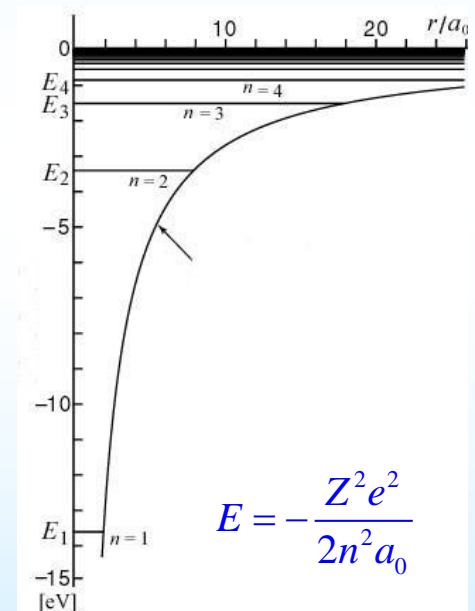


Oscylator harmoniczny

$$V(x) = 1/2kx^2$$



Potencjał Coulombowski atomu wodoru



Odległości pomiędzy poziomami wraz ze wzrastającą energią:

wzrastają

są stałe

maleją



Co dzieje się z potencjałem, że powoduje różny rozkład odległości poziomów oscylacyjnych?

- ◆ Studnia potencjałów ma stałą szerokość dla wszystkich energii
- ◆ W oscylatorze harmonicznym następuje poszerzenie wraz ze wzrostem energii
- ◆ Potencjał Coulombowski poszerza się znacznie wraz ze wzrostem energii

Wnioski:

Z eksperymentalnych pomiarów odległości między poziomami można wyznaczyć kształt potencjału rzeczywistej (anharmonicznej) cząsteczki



Podobieństwa i różnice

Podobieństwa

- ◆ Pokazują energię punktu zerowego
- ◆ Podobne oscylacyjne funkcje falowe

Różnice

- ◆ Odległości poziomów
- ◆ Minimalne wartości dla liczby kwantowej: $n_{\min}=1$, $v_{\min}=0$
- ◆ Wychylenia większe od klasycznej amplitudy oscylacji

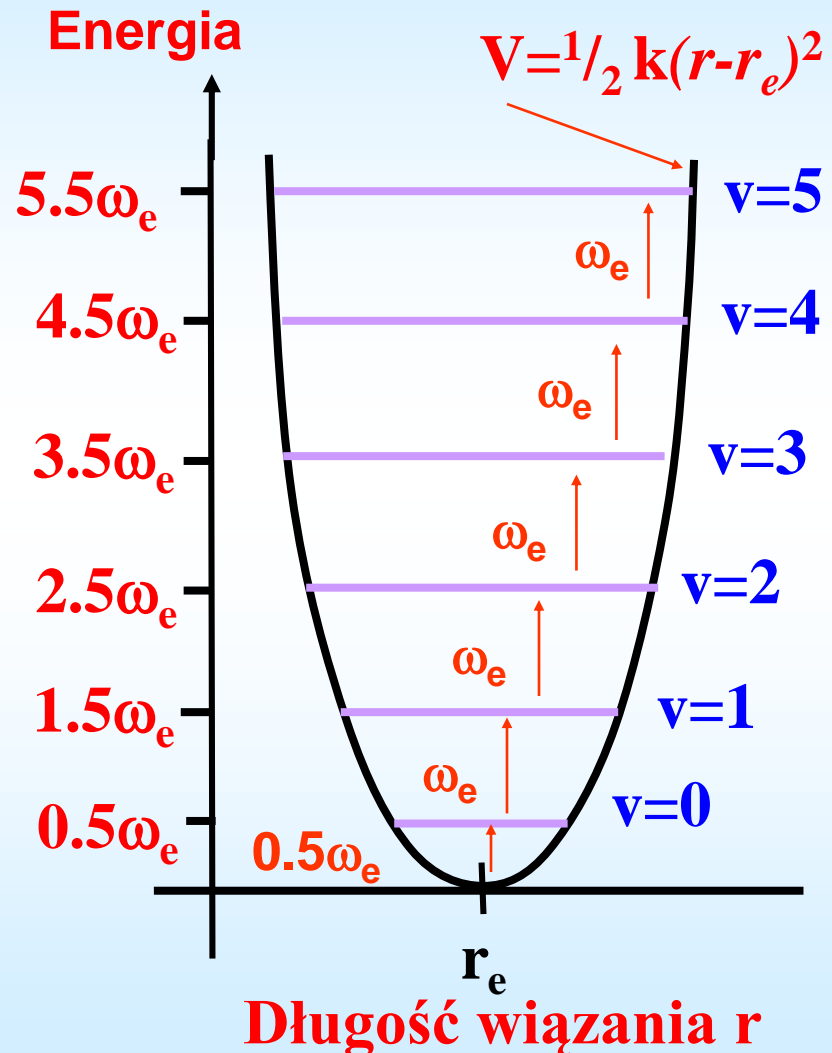
Oscylator Harmoniczny - Podsumowanie

Bardzo ważne!!!

- ◆ Poziomy energetyczne oddalone są o taką samą wartość ($\omega_e \text{ cm}^{-1}$)
- ◆ Wszystkie poziomy oscylacyjne nie są zdegenerowane tj. Jednemu stanowi kwantowemu odpowiada jeden poziom Najniższa energia oscylacyjna dla $v=0$, nigdy nie jest zerowa (w odróżnieniu od rotacji)

$$G_0 = (0 + \frac{1}{2}) \omega_e = 0.5 \omega_e$$

Jest to energia punktu zerowego





Przykład

Podstawowa częstość oscylacyjna cząsteczki H_2 wynosi 4200 cm^{-1} . Oblicz odległości poziomów oscylacyjnych i ZPE, w J i w kJ/mol.

$$h = 6.626 \times 10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}$$

$$c = 3.00 \times 10^{10}\text{ cm/s}$$

$$N_A = 6.02 \times 10^{23}\text{ mol}^{-1}$$

Odległość ΔE

$$\Delta E = hc\omega_e$$

$$\Delta E = (6.626 \cdot 10^{-34}\text{ Js})(3 \cdot 10^{10}\text{ cms}^{-1})(4200\text{ cm}^{-1}) = 8.3 \cdot 10^{-20}\text{ J}$$

$$N_A \cdot \Delta E = (6.02 \cdot 10^{23}\text{ mol}^{-1})(8.3 \cdot 10^{-20}\text{ J}) = 5 \cdot 10^4\text{ J/mol} = 50\text{ kJ/mol}$$

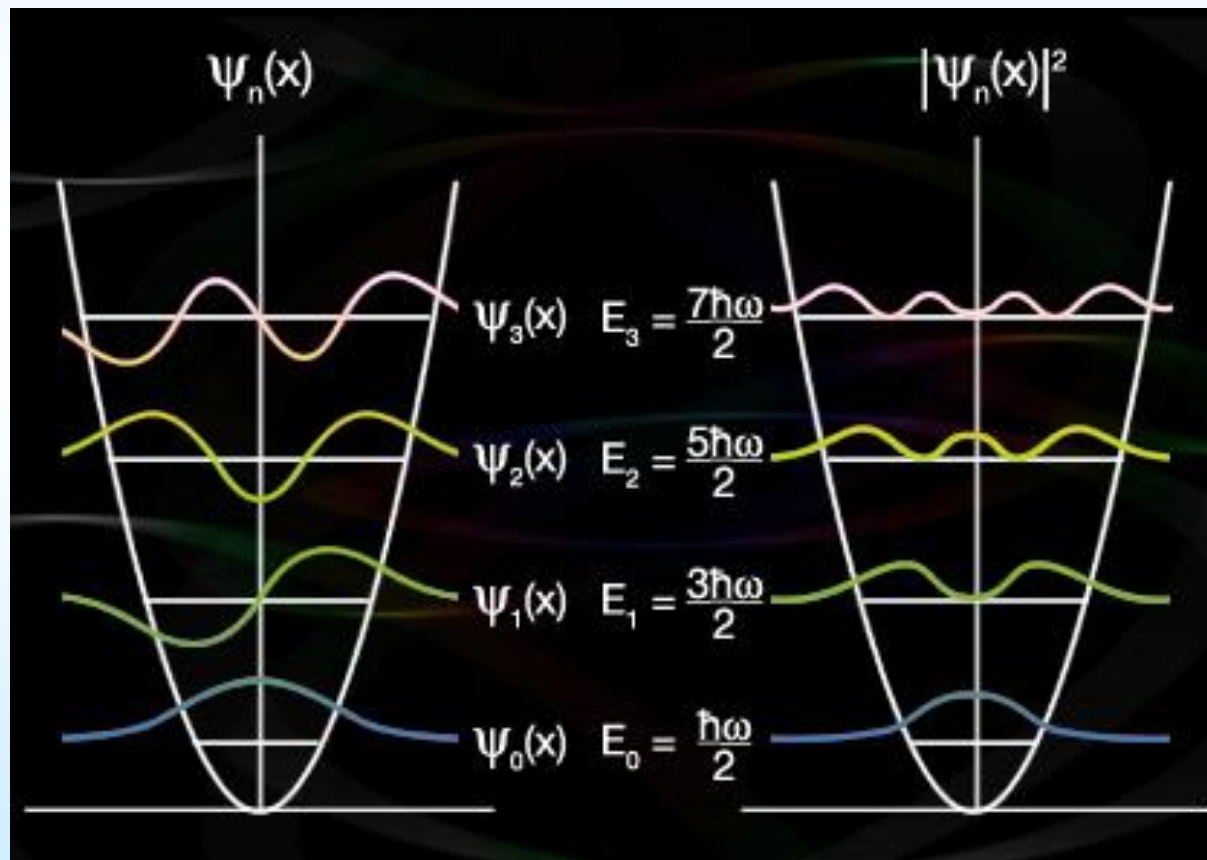
ZPE

$$E_0 = \frac{1}{2}hc\omega_e = \frac{1}{2}(6.626 \cdot 10^{-34}\text{ Js})(3 \cdot 10^{10}\text{ cms}^{-1})(4200\text{ cm}^{-1}) = 4.15 \cdot 10^{-20}\text{ J}$$

$$N_A E_0 = 25\text{ kJ/mol}$$



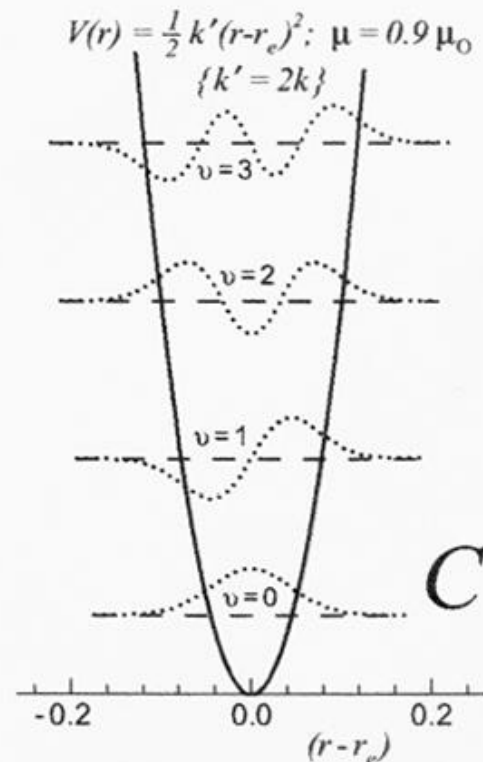
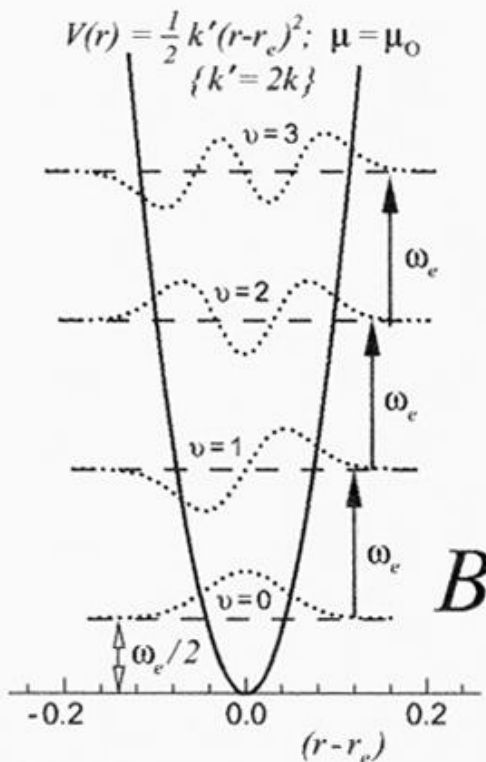
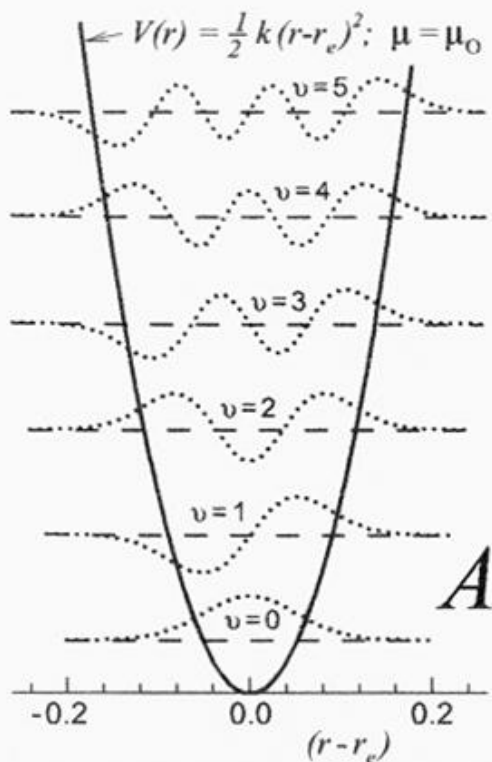
**Krzywa energii potencjalnej $V(R)$,
poziomy całkowitej energii,
funkcje falowe i
funkcje gęstości prawdopodobieństwa dla stanów $n=0, 1, 2, 3$**





$$E_v[cm^{-1}] = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad \omega_e = \frac{10^{-2}}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \Delta v = \pm 1$$

- Cząsteczki o sztywnych wiązaniach (**większe k**) odznaczają się większymi odległościami pomiędzy poziomami oscylacyjnymi
- Cięższe izotopomery odznaczają się mniejszymi odległościami pomiędzy poziomami oscylacyjnymi
- **B** i **C** mają identyczne krzywe energii potencjalnej (jednakowe k)





$$\omega_e = \frac{10^{-2}}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Dla cząsteczek dwuatomowych ω_e przyjmuje wartości od ok. 200 do 4500 cm^{-1}

Np. $\omega_e(\text{I}_2)=215 \text{ cm}^{-1}$

$\omega_e(\text{H}_2)=4395 \text{ cm}^{-1}$

Różnice w wartościach ω_e wynikają z różnych wartości k (H_2 posiada znacznie mocniejsze wiązanie) i różnych wartości μ [$\mu(\text{H}_2)=0.503912$ $\mu(\text{I}_2)=63.4522$]

Badanie „sztywności wiązań” – stałych siłowych jest jednym z przedmiotów badań spektroskopii oscylacyjnej

Odległości poziomów rotacyjnych ($0.1 \div 10 \text{ cm}^{-1}$) są znacznie mniejsze niż odległości poziomów oscylacyjnych



Przykład

Widmo IR $^{79}\text{Br}^{19}\text{F}$ zawiera pojedynczą linię przy 380 cm^{-1}

Oblicz stałą siłową wiązania Br-F w N/m.

$$\mu = \frac{m_{\text{Br}} \cdot m_{\text{F}}}{m_{\text{Br}} + m_{\text{F}}} = \frac{(79\text{ amu}) \cdot (19\text{ amu})}{79\text{ amu} + 19\text{ amu}}$$

$$h = 6.63 \times 10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}$$

$$c = 3.00 \times 10^8\text{ m/s}$$

$$c = 3.00 \times 10^{10}\text{ cm/s}$$

$$1\text{ amu} = 1.66 \times 10^{-27}\text{ kg}$$

$$1\text{ N} = 1\text{ kg}\cdot\text{m/s}^2$$

$$\mu = 15.32\text{ amu} \cdot 1.66 \times 10^{-27}\text{ kg / amu} = 2.54 \times 10^{-26}\text{ kg}$$

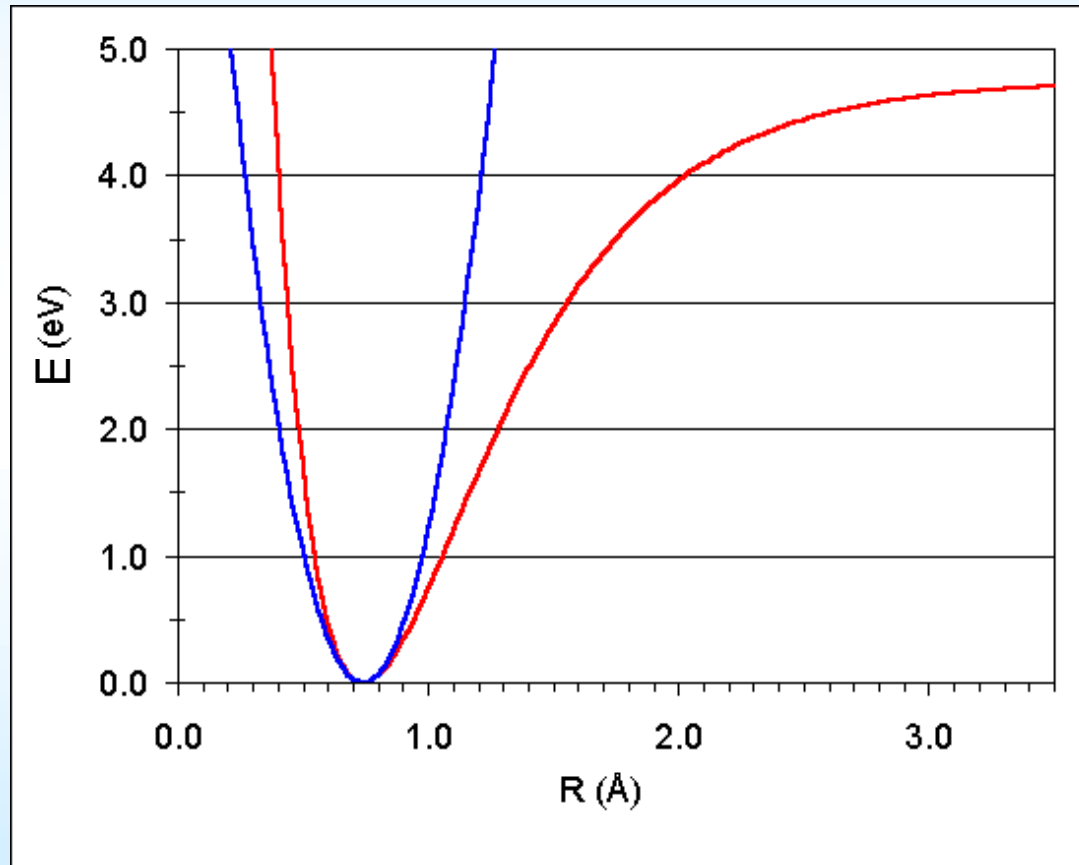
$$\omega_e = \frac{10^{-2}}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \longrightarrow k = \frac{(2\pi c \omega_e)^2 \mu}{10^{-4}} = \left[2(3.14)(3 \times 10^{10}\text{ cm/s})(380\text{ cm}^{-1}) \right]^2 (2.54 \times 10^{-26}\text{ kg})$$

$$k = 130\text{ kg / s}^2 = 130(\text{kg} \cdot \text{m} / \text{s}^2) / \text{m} = 130\text{ N / m}$$



Oscylator Anharmoniczny

$1\text{eV}=1.602\times 10^{-19}\text{J}$





Cząsteczki dwuatomowe – Oscylator anharmoniczny

Krzywa energii potencjalnej **rzeczywistej cząsteczki** różni się od paraboli oscylatora harmonicznego:

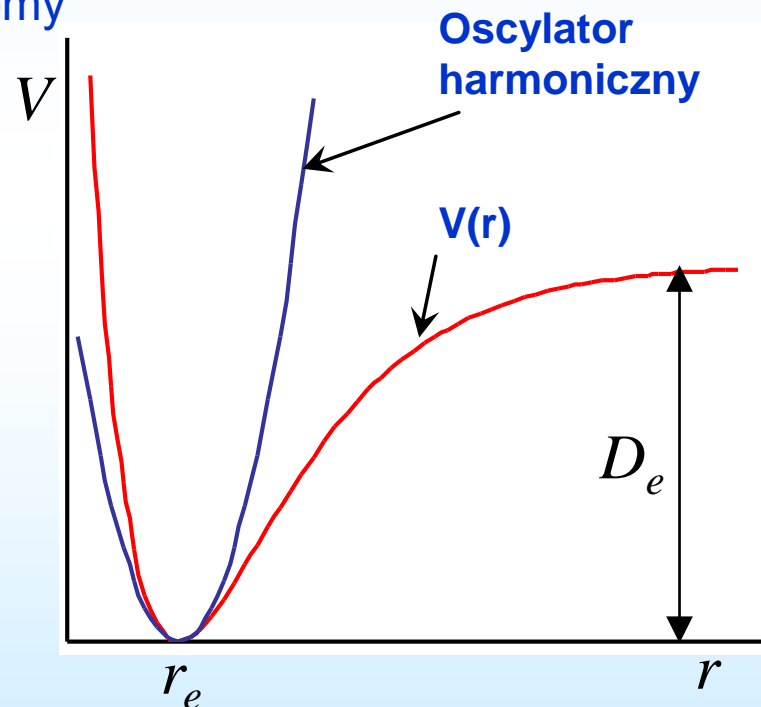
- ❖ Jest **asymetryczna**
- ❖ Przy odpowiednio dużym r krzywa staje się horyzontalna z powodu możliwości **dysocjacji** cząsteczki na atomy

Zmiany energii potencjalnej w zależności od r najlepiej przedstawia **potencjał Morse'a**:

$$V(r) = D_e \left[1 - e^{-\beta(r-r_e)} \right]^2$$
$$= D_e \left[e^{-2\beta(r-r_e)} - 2e^{-\beta(r-r_e)} + 1 \right]$$

Odpychanie krótkiego zasięgu Przyciąganie dalekiego zasięgu Asymptota ($r \rightarrow \infty$) energia D_e

$$\beta = \omega \sqrt{\frac{2\pi^2 c \mu}{D_e h}}$$



D_e – energia dysocjacji

β - określa **sztwywność wiązania** i jest związana ze stałą siłową k .



Oscylator anharmoniczny

Rozwiązując równanie Schrödingera dla oscylatora anharmonicznego otrzymujemy

$$E_v (cm^{-1}) = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

$$\omega_e [J] = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{2D_e \beta^2}{\mu}}$$

$$\omega_e x_e [J] = \frac{h^2 \beta^2}{8\pi^2 \mu}$$

$$\omega_e [cm^{-1}] = 2 \sqrt{D_e \beta^2 \frac{16.857629}{\mu}}$$

$$\omega_e x_e [cm^{-1}] = \frac{16.857629}{\mu} \beta^2$$

$$\beta = \omega \sqrt{\frac{2\pi^2 c \mu}{D_e h}}$$

$$D_e = \frac{(\omega_e)^2}{4\omega_e x_e}$$



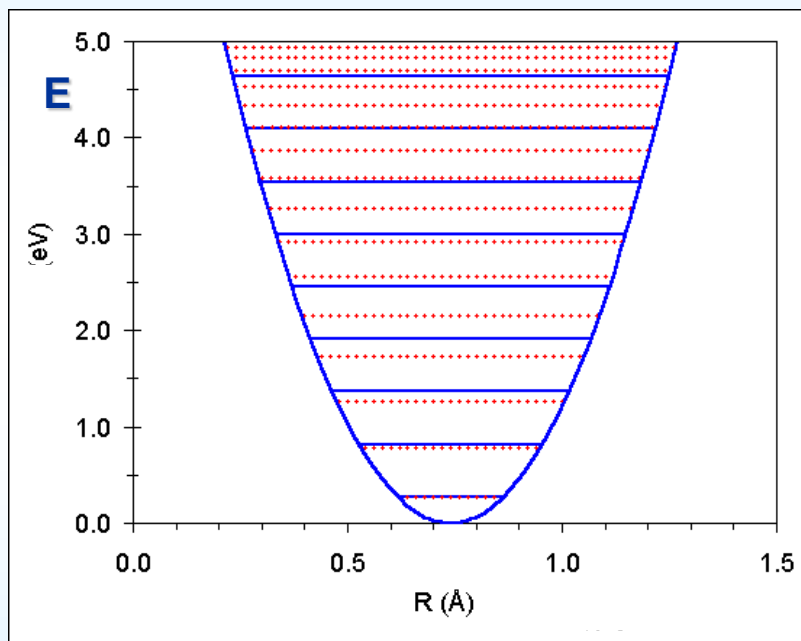
Oscylator anharmoniczny

Odległości pomiędzy poziomami oscylacyjnymi wynoszą:

$$\begin{aligned}\Delta E_\nu &= E(\nu+1) - E(\nu) = \omega_e \left(\nu+1 + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(\nu+1 + \frac{1}{2} \right)^2 - \\ &\quad - \left[\omega_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 \right] = \\ &= \omega_e - 2\omega_e x_e (\nu+1)\end{aligned}$$

Wraz ze wzrostem ν (a tym samym energii), odległości pomiędzy poziomami oscylacyjnymi systematycznie **zmniejszają się**.

Poziomy energetyczne oscylatora harmonicznego/anharmonicznego



$$E_v(\text{cm}^{-1}) = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right)$$

$$\Delta E_v = \omega_e$$

$$E_v(\text{cm}^{-1}) = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

$$\Delta E_v = \omega_e - 2\omega_e x_e (v + 1)$$



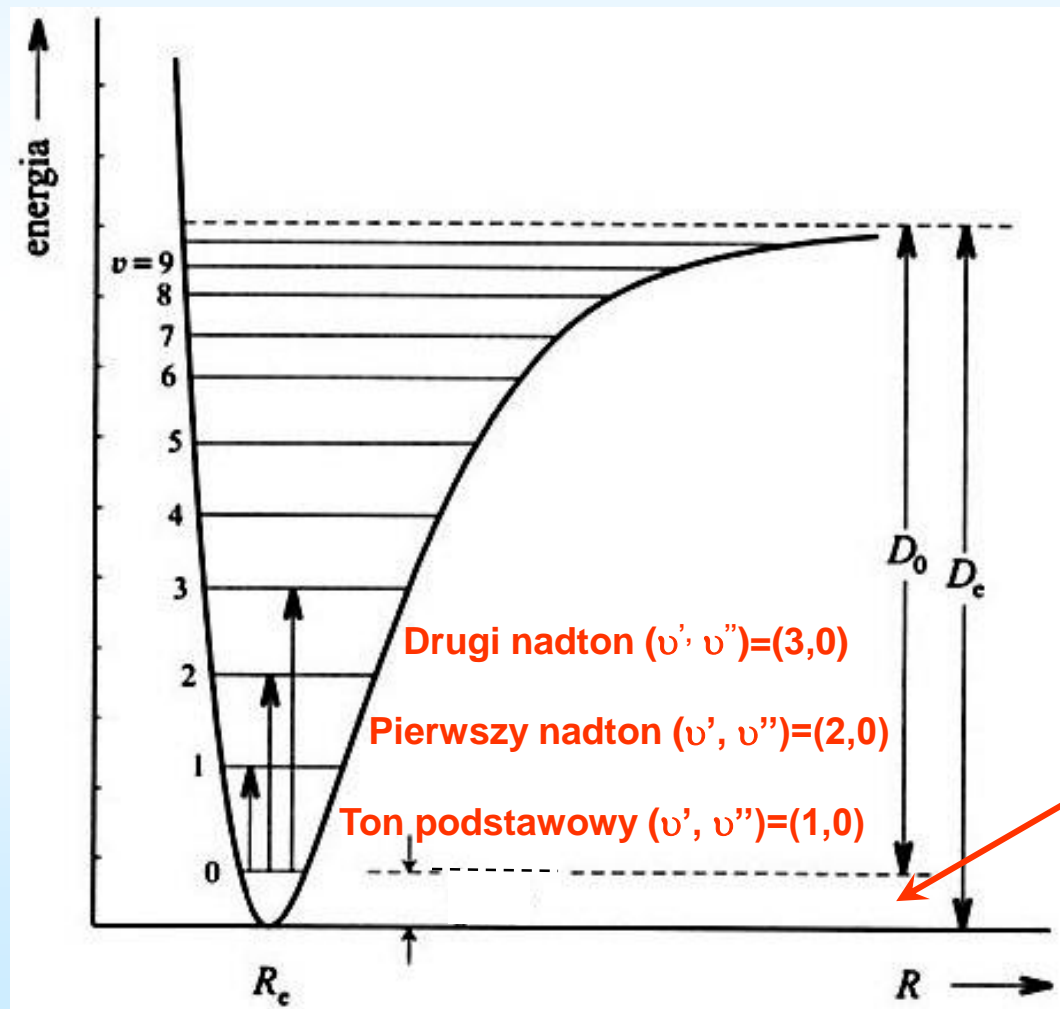
Oscylator harmoniczny



Oscylator anharmoniczny



Kilka definicji



D_e głębokość krzywej – energia dysocjacji

D_0 energia dysocjacji z najniżej obsadzonego poziomu

energia drgań zerowych

$$D_e - D_0 = \frac{1}{2} \omega_e$$

Obliczenie współczynnika anharmoniczności x i “równowagowej” stałej oscylacyjnej ω_e

Podstawowe pasmo absorpcyjne

$$v = 0 \rightarrow v = 1$$

$$\varepsilon = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - x \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

$$\Delta\varepsilon = \omega_e \left[\left(1 + \frac{1}{2} \right) - x \left(1 + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} + x \left(\frac{1}{2} \right)^2 \right]$$

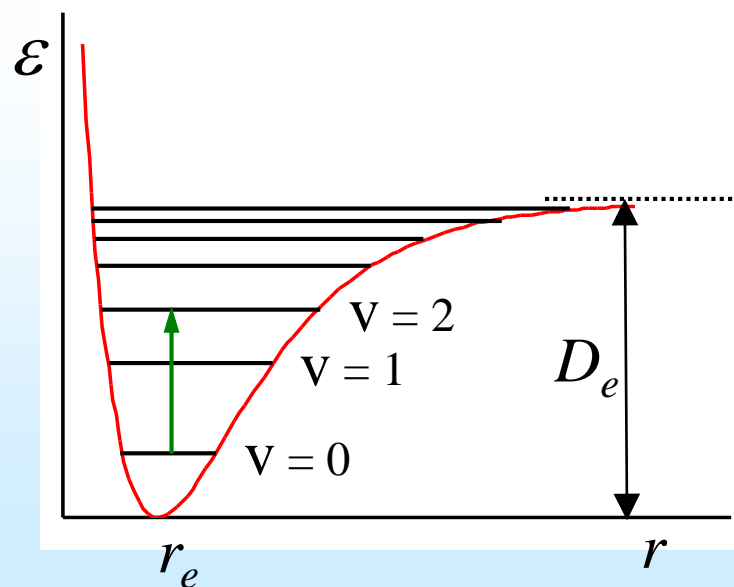
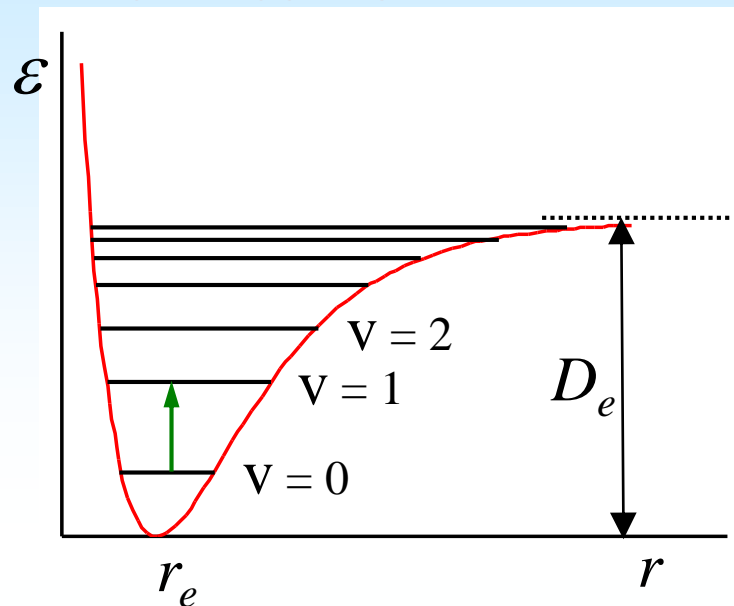
$$\Delta\varepsilon = \omega_e (1 - 2x) \quad \text{cm}^{-1}$$

1st nadton

$$v = 0 \rightarrow v = 2$$

$$\Delta\varepsilon = \omega_e \left[\left(2 + \frac{1}{2} \right) - x \left(2 + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} + x \left(\frac{1}{2} \right)^2 \right]$$

$$\Delta\varepsilon = 2\omega_e (1 - 3x) \quad \text{cm}^{-1}$$





Obliczanie współczynnika anharmoniczności x i “równowagowej” stałej oscylacyjnej

Dla **CO** pasmo podstawowe 2143 cm^{-1}

1st nadton 4260 cm^{-1}

Piszemy dwa równania z dwiema niewiadomymi

$$(1) \quad \omega_e(1-2x) = \omega_e - 2x\omega_e = 2143 \text{ cm}^{-1}$$

$$(2) \quad 2\omega_e(1-3x) = 2\omega_e - 6x\omega_e = 4260 \text{ cm}^{-1}$$

Mnożymy równanie (1) przez 3 :

$$(3) \quad 3\omega_e - 6x\omega_e = 6429 \text{ cm}^{-1}$$

Odejmujemy równanie (2) od (3) :

$$\omega_e = 2169 \text{ cm}^{-1}$$

Otrzymujemy

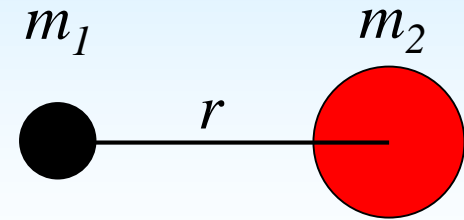
$$x = 0.0060$$



Obliczanie stałej siłowej k

Dla hipotetycznego oscylatora harmonicznego o tej samej stałej siłowej

$$\omega_e = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{gdzie} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$



Przekształcając otrzymujemy: $k = (2\pi c \omega_e)^2 \mu$

Np. dla cząsteczki **CO** $\omega_e = 2169 \text{ cm}^{-1}$, $c = 3.0 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$

$$\mu = \frac{12 \times 16}{12 + 16} \times \frac{10^{-3}}{6.022 \times 10^{23}} \text{ kg} = 1.139 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

$$k = (2\pi \times 3.0 \times 10^{10} \times 2169)^2 \times 1.139 \times 10^{-26} \text{ N m}^{-1}$$

$$k = 1904 \text{ N m}^{-1}$$

k jest miarą sztywności wiązania

Rozkład energii w stanie równowagi

Rozkład Boltzmann określa względną liczbę cząsteczek przypadających na stany kwantowe o różnych energiach dla układu w temperaturze T znajdującego się w stanie równowagi (stosunek obsadzeń dwu stanów „f” i „i” różniących się energią)

$$\frac{N_f}{N_i} = \frac{g_f}{g_i} e^{\left(\frac{-\Delta E}{kT}\right)}$$

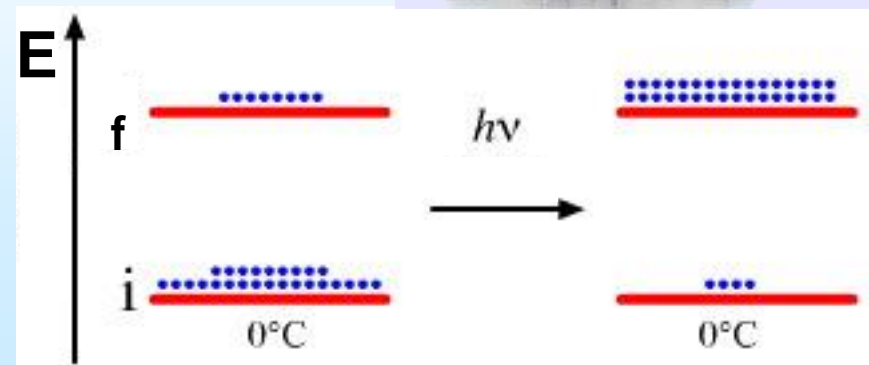
N_f liczba obsadzeń poziomu końcowego

N_i liczba obsadzeń poziomu początkowego

g_i degeneracja poziomu i

$$\frac{N_f}{N_i} \rightarrow 1 \quad \Delta E \rightarrow 0 \text{ lub gdy } T \rightarrow \infty$$

$$\frac{N_f}{N_i} \rightarrow 0 \quad \Delta E \rightarrow \infty \text{ lub gdy } T \rightarrow 0$$



Rozkład energii w stanie równowagi

Rozkład Boltzmann określa względną liczbę cząsteczek przypadających na stany kwantowe o różnych energiach dla układu w temperaturze T znajdującego się w stanie równowagi (stosunek obsadzeń dwu stanów „f” i „i” różniących się energią)

$$\frac{N_f}{N_i} = \frac{g_f}{g_i} e^{\left(\frac{-\Delta E}{kT}\right)}$$

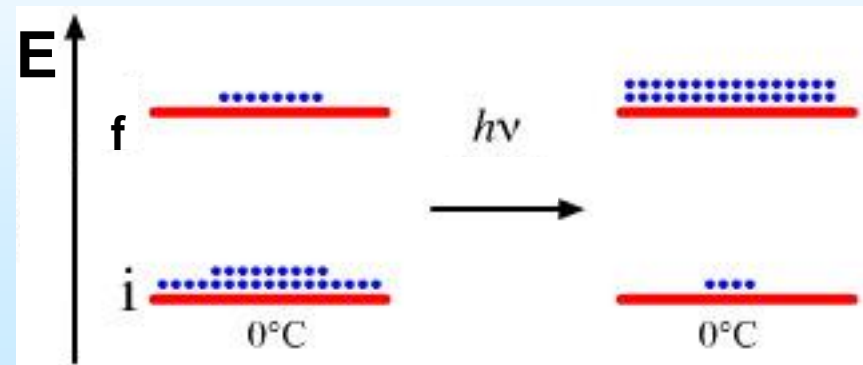
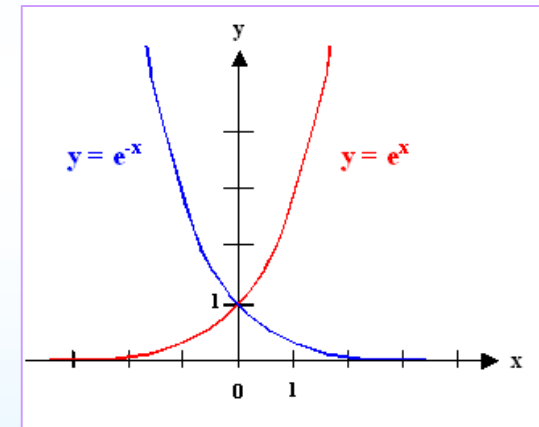
N_f liczba obsadzeń poziomu końcowego

N_i liczba obsadzeń poziomu początkowego

g_i degeneracja poziomu i

$$\frac{N_f}{N_i} \rightarrow 1 \quad \Delta E \rightarrow 0 \text{ lub gdy } T \rightarrow \infty$$

$$\frac{N_f}{N_i} \rightarrow 0 \quad \Delta E \rightarrow \infty \text{ lub gdy } T \rightarrow 0$$



Przejścia oscylacyjne

Zgodnie z regułą wyboru dla oscylatora harmonicznego

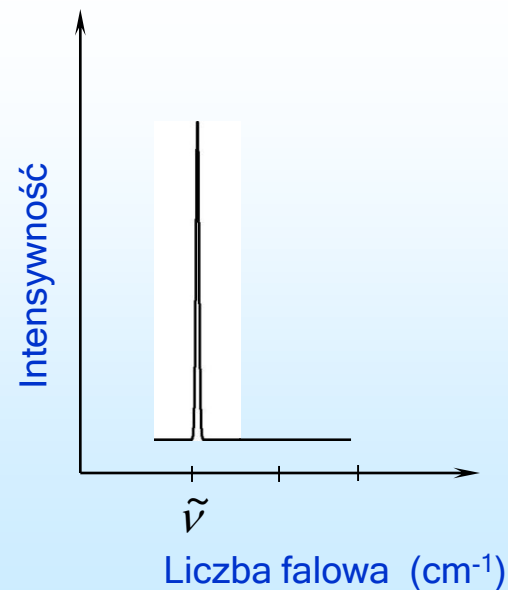
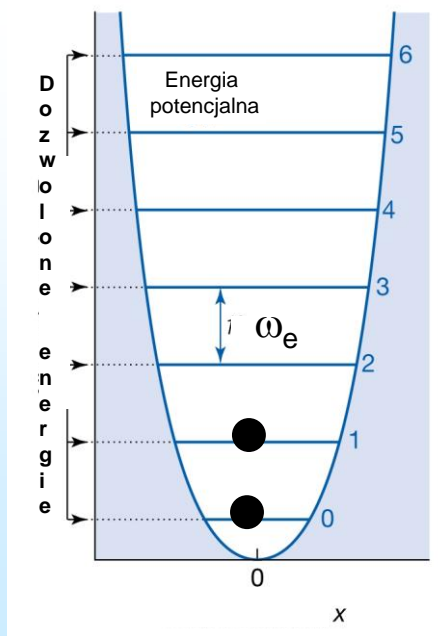
$$\Delta v = \pm 1$$

Zgodnie z rozkładem Boltzmanna większość cząsteczek przebywa na podstawowym poziomie oscylacyjnym ($v=0$).

Widmo IR jest zdominowane przez przejścia z podstawowego poziomu oscylacyjnego na pierwszy poziom wzbudzony.

$$(1 \leftarrow 0)$$

$$\begin{aligned} \Delta G_{1 \leftarrow 0} &= \omega_e = \\ &= \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{m_{ef}}} \end{aligned}$$

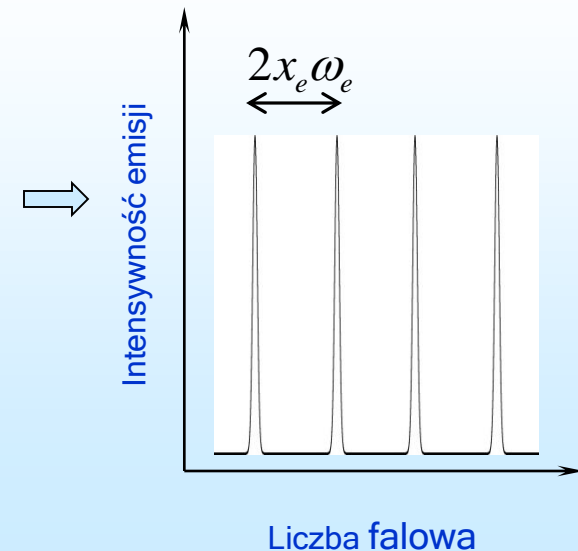
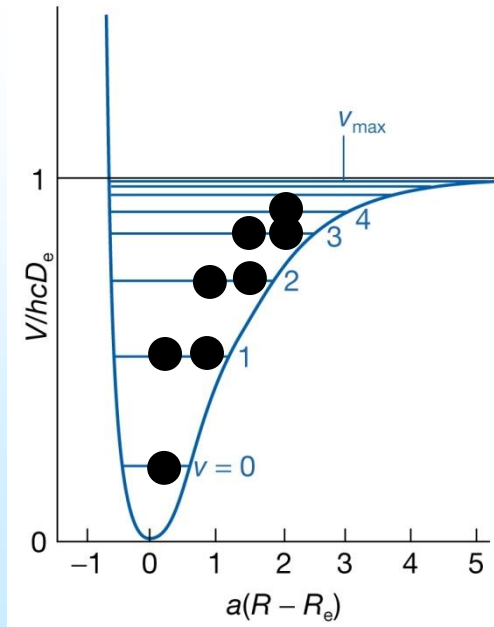




Przejścia oscylacyjne

Jeżeli cząsteczka znajduje się na wzbudzonych poziomach oscylacyjnych, mogą być zaobserwowane sygnały emisyjne pochodzące od przejść innych niż $1 \leftarrow 0$. W przybliżeniu harmonicznym sygnały powinny pojawiać się przy tej samej częstotliwości. W rzeczywistości, obserwujemy je w nieco innych pozycjach ze względu na anharmoniczność drgań.

$$\Delta G_{v+1 \rightarrow v} = \omega_e - 2x_e \omega_e (v+1)$$



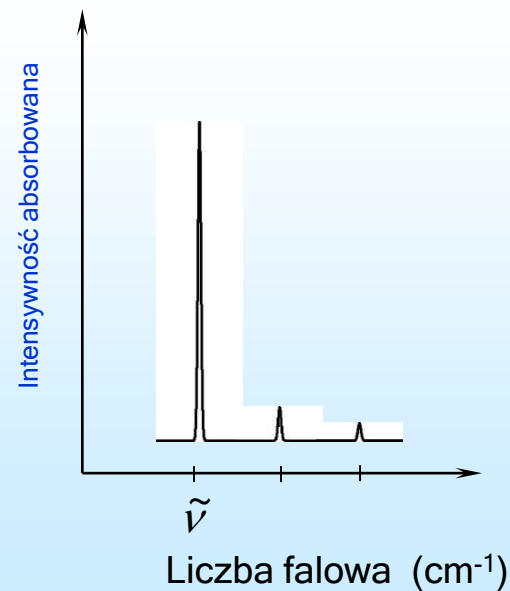
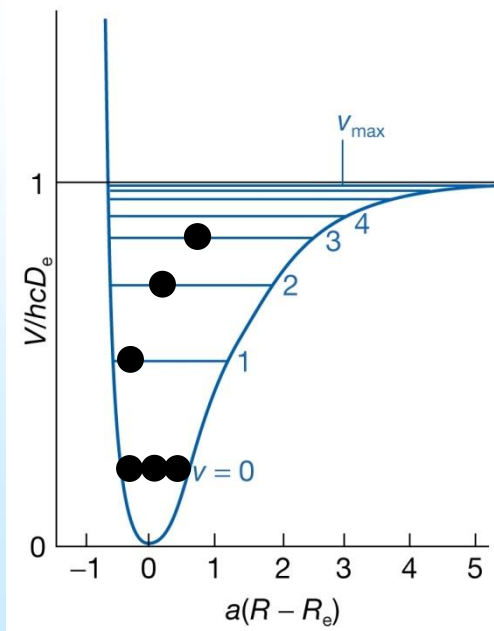


Przejścia oscylacyjne

Reguła wyboru $\Delta v = \pm 1$ wynika z przybliżenia harmonicznego.

Gdy weźmiemy pod uwagę anharmoniczność reguła wyboru nie jest ściśle zachowana i wszystkie wartości Δv są dozwolone.

Eksperymentalnym potwierdzeniem jest obecność słabych nadtonów w widmie absorpcyjnym, odpowiadającym przejściom **$2 \leftarrow 0$** , **$3 \leftarrow 0$** , etc.





Podsumowanie – oscylator harmoniczny

Dobry model oscylacji atomów w cząsteczkach $V(r)=1/2k(r-r_e)^2$

Wg fizyki klasycznej częstość oscylacji $\nu_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} [s^{-1}]$ $\omega_e = \frac{10^{-2}}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} [cm^{-1}]$

Według mechaniki kwantowej energia jest skwantowana $E_{osc}[cm^{-1}]=\omega_e(\nu+1/2)$

Odległości poziomów oscylacyjnych są jednakowe i równe $\Delta E=\omega_e$

Przejścia oscylacyjne są dozwolone tylko gdy $\Delta\nu=\pm 1$ oraz gdy drganiu towarzyszy **zmiana momentu dipolowego**



Podsumowanie – oscylator Morse'a

Energia potencjalna

$$V(r) = D_e \left[1 - e^{-\beta(r-r_e)} \right]^2$$

Według mechaniki kwantowej

$$E_{osc}(\nu) = \omega_e \left(\nu + 1/2 \right) - \omega_e x_e \left(\nu + 1/2 \right)^2$$

Odległości pomiędzy poziomami oscylacyjnymi **maleją** ze wzrostem ν

$$\Delta E_{osc} = \omega_e - 2\omega_e x_e (\nu + 1)$$