

1. Izračunati rotacionu konstantu i dužinu veze molekula $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, ako rastojanje između rotacionih linija iznosi $3,86 \text{ cm}^{-1}$.

$$B = 1,93 \text{ cm}^{-1}$$

$$r = 1,13 \text{ Å}$$

2. Rotacione konstante molekula $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ u osnovnom i prvom pobuđenom vibracionom stanju iznose $1,9314 \text{ cm}^{-1}$ i $1,6116 \text{ cm}^{-1}$, redom. Za koliko se promeni međuatomsko rastojanje molekula usled ovog vibracionog prelaza?

$$\Delta r = 0,1 \text{ Å}$$

3. Molekul $^{16}\text{O}_2$ ima vibracionu konstantu $\omega_e = 1580 \text{ cm}^{-1}$. Izračunati konstantu sile veze.

$$k = 7,45 \times 10^{-3} \frac{\text{N}}{\text{m}}$$

4. Izvesti izraze za položaj osnovne trake, prve dve vruće trake i prva dva viša harmonika.

5. Osnovna traka HF molekula javlja se na 3958 cm^{-1} , a prvi harmonik na 7737 cm^{-1} . Izračunati vibracionu konstantu ω_e , konstantu anharmoničnosti $\omega_e x_e$ i nultu energiju molekula $G(0)$ (u cm^{-1}).

$$\omega_e = 4137,0 \text{ cm}^{-1}$$

$$\omega_e x_e = 89,5 \text{ cm}^{-1}$$

$$G(0) = 44,8 \text{ cm}^{-1}$$

6. Kod molekula $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, rotaciona konstanta i početak trake prelaza $v'=1 \leftarrow v''=0$ iznose $B = 58 \times 10^3 \text{ MHz}$ i $\tilde{\nu}_0 = 2160,0 \text{ cm}^{-1}$, redom. Izračunati položaje prve tri linije u R- i P-grani vibraciono-rotacionog spektra.

$$\tilde{\nu}_R = 2160,0 \text{ cm}^{-1} + (3,87 \text{ cm}^{-1})(J''+1), \quad J'' = 0,1,2,\dots$$

$$\tilde{\nu}_P = 2160,0 \text{ cm}^{-1} - (3,87 \text{ cm}^{-1})J'', \quad J'' = 1,2,3,\dots$$