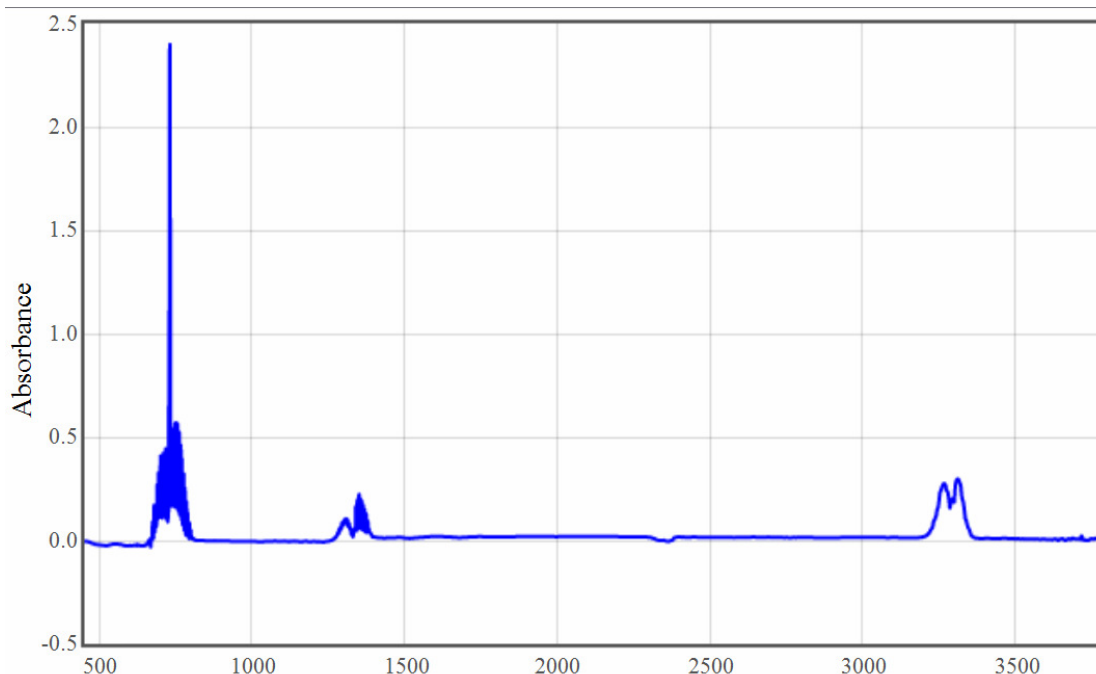


2^η Σειρά Ασκήσεων Μοριακής Φασματοσκοπίας

1. Οι φασματοσκοπικές σταθερές περιστροφής του CH_3I είναι 5.173931 cm^{-1} και $0.250215625 \text{ cm}^{-1}$, ενώ οι σταθερές φυγοκεντρικής διορθώσεως είναι $D_J = 0.2103983 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$, $D_{JK} = 3.294545 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ και $D_K = 87.34 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ [R. Paso and R. Antilla, *J. Molec. Spectr.* **140**, 46–53 (1990)]. Να υπολογίσετε τον κυματαριθμό της μεταπτώσεως $|4\ 2\ 1\rangle \leftarrow |3\ 2\ 1\rangle$.



2. Το ακετυλένιο εκτελεί τις εξής κανονικές δονήσεις: ν_1 συμμετρική έκταση H, ν_2 έκταση $\text{C}\equiv\text{C}$, ν_3 ασύμμετρη έκταση H, ν_4 κάμψη trans και ν_5 κάμψη cis, οι οποίες ακολουθούν την ενεργειακή κατάταξη $\nu_4 < \nu_5 < \nu_2 < \nu_3 < \nu_1$. Στο απλοποιημένο φάσμα που ακολουθεί εμφανίζονται πολύ ισχυρές κορυφές (vs) από θεμελιώδεις μεταπτώσεις, μέτριας εντάσεως (m) από συνδυασμούς διεγέρσεως δύο κανονικών τρόπων δονήσεων και ασθενείς (w) από υπέρτονες ή άλλες μεταπτώσεις συνδυασμού. Υπολογίστε τις δονητικές σταθερές κάθε κανονικού τρόπου δονήσεως και συμπληρώστε τον πίνακα με την ανάλυση του κυματαριθμού κάθε κορυφής ώστε να φαίνεται η μεταβολή των κβαντικών αριθμών κάθε εμπλεκόμενου τρόπου δονήσεως (π.χ. $\nu_3 + 2\nu_2$). Θυμηθείτε ότι στο υπέρυθρο ενεργές είναι μόνο οι μεταπτώσεις στις οποίες μεταβάλλεται η διπολική ροπή κατά τη δόνηση.

α/α	Θέση (cm^{-1})	Ενταση	
1	730	vs	
2	1340	m	
3	1950	w	
4	2700	m	
5	3290	vs	
6	3310	w	
7	3900	m	
8	4100	m	
9	5260	m	
10	6660	m	

$\nu_1 =$

$\nu_2 =$

$\nu_3 =$

$\nu_4 =$

$\nu_5 =$

3. Ποιές από τις παρακάτω μεταπτώσεις διατομικών μορίων είναι επιτρεπτές και εξαιτίας τίνος κανόνα επιλογής είναι απαγορευμένες οι άλλες; Υπάρχει κάποια αδύνατη (ενώ οι απαγορευμένες είναι πολύ μικρής εντάσεως) μετάπτωση; $^1\Pi_g - ^1\Pi_u$, $^1\Delta_u - ^1\Sigma_g^+$, $^3\Phi_g - ^1\Pi_g$, $^4\Sigma_g^+ - ^2\Sigma_u^+$, $^2\Sigma_g^+ - ^3\Sigma_u^+$, $^4\Gamma - ^4\Phi$, $^2\Pi_{3/2} - ^2\Sigma^+$, $^3\Pi_g - ^3\Pi_g$.
4. Για το μόριο $^{88}\text{Sr}^{32}\text{S}$ προσδιορίστηκαν οι ακόλουθες τιμές φασματοσκοπικών σταθερών για την μετάπτωση $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$: $T_e = 13932.707 \text{ cm}^{-1}$, $\omega'_e = 339.145 \text{ cm}^{-1}$, $\omega'_e x'_e = 0.5524 \text{ cm}^{-1}$, $R'_e = 2.52260 \text{ \AA}$, $D'_0 = 3.48 \text{ eV}$, $\omega''_e = 388.264 \text{ cm}^{-1}$, $\omega''_e x''_e = 1.280 \text{ cm}^{-1}$, $R''_e = 2.43968 \text{ \AA}$, $D'_0 \approx 3 \text{ eV}$. Να υπολογίσετε α) τις φασματοσκοπικές σταθερές περιστροφής για τις δύο ηλεκτρονιακές καταστάσεις, β) τις παραμέτρους του δυναμικού Morse για τις δύο καταστάσεις. Να σχεδιάσετε σε κοινό διάγραμμα τις καμπύλες δυναμικής ενέργειας. Να σχεδιάσετε την κατανομή περιστροφικών καταστάσεων για την θεμελιώδη ηλεκτρονική κατάσταση, για θερμοκρασία του αερίου ίση με 400 K. Να σχεδιάσετε διάγραμμα Fortrat με τους κλάδους P και R για τις δονητικές μεταπτώσεις $(v', v'') = (0, 0)$, $(1, 1)$ και $(1, 0)$ για τιμές J μεταξύ 0 και 120. Σε ποιο κλάδο της $(0, 0)$ εμφανίζεται κεφαλή, σε ποια τιμή J και σε ποιον κυματαριθμό; Δίνονται οι μάζες των ισότοπων (σε g/mol), S: 31.9720707, Sr: 87.905617

18/12/2016