

3^η Σειρά Ασκήσεων Μοριακής Φασματοσκοπίας

1. Δίνονται τα μήκη δεσμών του βενζολίου $r_{CC} = 1.399 \text{ \AA}$ και $r_{CH} = 1.101 \text{ \AA}$ (CRC Handbook of Chemistry and Physics, 83rd Ed., 9-27). Να υπολογισθούν οι ροπές αδρανείας I_a , I_b , I_c και οι αντίστοιχες φασματοσκοπικές σταθερές περιστροφής A, B, C. Να χαρακτηριστεί ως στρόβος το μόριο και να βρεθεί η διεύθυνση της διπολικής ροπής του. Να υπολογισθεί ο κυματαριθμός της μεταπτώσεως $J = 8 \leftarrow 7$, $K = 2 \leftarrow 2$.
2. Η χαμηλότερη μετάπτωση του $^1\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ στα μικροκύματα εμφανίζεται στα 88631 MHz, ενώ του $^1\text{H}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$ στα 72415 MHz. Να υπολογισθούν τα μήκη δεσμών.
3. Δίνονται οι μεταπτώσεις του $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ για $J = 1 - 0$, 48990.978 MHz, $J = 2 - 1$, 97980.950 MHz, $J = 3 - 2$, 146969.033 MHz και $J = 4 - 3$ 195954.226 MHz. Να θεωρήσετε ότι η ενέργεια περιστροφής του μορίου περιγράφεται επαρκώς με την βοήθεια των σταθερών B_e και D_e , να γράψετε την έκφραση για τις ενεργειακές διαφορές (μεταπτώσεις) και να προσδιορίσετε τις φασματοσκοπικές σταθερές με προσαρμογή ελαχίστων τετραγώνων σε αυτή την έκφραση. Τέλος να υπολογίζετε το μήκος δεσμού του μορίου.

15/4/2008