

4^η Σειρά Ασκήσεων Μοριακής Φασματοσκοπίας

1. Δίνονται οι φασματοσκοπικές σταθερές Y_{ij} αναπτύγματος δονητικής και περιστροφικής ενέργειας κατά Dunham για το $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ σε cm^{-1} :

i \ j =	0	1	2	3
0		1.9312808724	-6.121468e-06	5.8272e-12
1	2169.8135802	-0.0175044121	1.1526e-09	-1.7375e-13
2	-13.2883076	5.487e-07	-1.8050e-10	
3	0.01051127	2.541e-08		
4	5.7440e-05			
5	9.831e-07			
6	-3.166e-08			

Να υπολογίσετε την ολική (δονητική και περιστροφική) ενέργεια του μορίου στην κατάσταση $v = 4, J = 12$. Να υπολογίσετε τις τιμές των σταθερών Y_{11} και Y_{02} για το μόριο $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$.

2. Ένα διατομικό μόριο διεγείρεται από την θεμελιώδη ηλεκτρονιακή και δονητική κατάσταση στην δεύτερη διεγερμένη δονητική κατάσταση. Ο κβαντικός αριθμός περιστροφής μπορεί να μεταβληθεί κατά $+1$ ή -1 . Αν η ενέργεια του μορίου περιγράφεται από τις φασματοσκοπικές σταθερές $\omega_e, \omega_e x_e, B_e, D_e$ και a_e , να γραφούν οι αναλυτικές εκφράσεις για τις θέσεις των κορυφών των μεταπτώσεων ($v=0, J''$) \rightarrow ($v=2, J'=J''\pm 1$).

30/5/2007