

#### 4<sup>η</sup>, 5<sup>η</sup> και 6<sup>η</sup> Σειρά Ασκήσεων Μοριακής Φασματοσκοπίας

1. Δίνονται οι δονητικές φασματοσκοπικές σταθερές για το γραμμικό XeF<sub>2</sub>:  $\omega_1 = 526.0 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 214.2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_3 = 566.1 \text{ cm}^{-1}$ ,  $x_{11} = -1.73 \text{ cm}^{-1}$ ,  $x_{12} = -1.05 \text{ cm}^{-1}$ ,  $x_{13} = -4.58 \text{ cm}^{-1}$ ,  $x_{22} = -0.20 \text{ cm}^{-1}$ ,  $x_{23} = -1.44 \text{ cm}^{-1}$ ,  $x_{33} = -1.09 \text{ cm}^{-1}$ ,  $g_{22} = 0.08 \text{ cm}^{-1}$  [*J. Chem. Phys.* **101**, 1 (1994)]. Να υπολογίσετε τον κυματριθμό του φωτονίου που μπορεί να προκαλέσει την μετάπτωση  $(1\ 1^1\ 0) \leftarrow (0\ 0^0\ 0)$ .
2. Δίνονται οι φασματοσκοπικές σταθερές του IF:  $\omega_e = 610.258 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_e x_e = 3.141 \text{ cm}^{-1}$ ,  $B_e = 0.279711 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\alpha_e = 0.001874 \text{ cm}^{-1}$ . α) Να υπολογισθεί το μήκος του δεσμού. β) Να γραφούν οι γενικές σχέσεις που δίνουν τις θέσεις των κορυφών των κλάδων P και R για την πρώτη υπέρτονη δονητική μετάπτωση ( $v: 0 \rightarrow 2$ ). γ) Να υπολογισθούν οι θέσεις (σε  $\text{cm}^{-1}$ ) των τρίτων κορυφών των κλάδων P και R της πρώτης υπέρτονης.
3. Ποιές από τις παρακάτω μεταπτώσεις διατομικών μορίων είναι απαγορευμένες και εξαιτίας τίνος κανόνα επιλογής:  $^1\Pi_g - ^1\Pi_u$ ,  $^1\Delta_u - ^1\Sigma_g^+$ ,  $^3\Phi_g - ^1\Pi_g$ ,  $^4\Sigma_g^+ - ^2\Sigma_u^+$ ,  $^2\Sigma_g^+ - ^3\Sigma_u^+$ ,  $^4\Gamma - ^4\Phi$ ,  $^2\Pi_{3/2} - ^2\Sigma^+$ ,  $^3\Pi_g - ^3\Pi_g$ .
4. Δίνονται οι φασματοσκοπικές σταθερές του  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  για τις καταστάσεις  $X^1\Sigma^+$  και  $A^1\Pi$ .  
X:  $\omega_e = 2169.81358 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_e x_e = 13.2883 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_e y_e = 0.0105113 \text{ cm}^{-1}$ ,  $B_e = 1.9312809 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\alpha_e = 0.01750441 \text{ cm}^{-1}$ ,  $D_e = 6.1215 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ .  
A:  $\omega_e = 1518.24 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_e x_e = 19.40 \text{ cm}^{-1}$ ,  $B_e = 1.6115 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\alpha_e = 0.02325 \text{ cm}^{-1}$ ,  $D_e = 7.33 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ ,  $T = 65074.8 \text{ cm}^{-1}$ .  
Να κατασκευασθεί διάγραμμα Fortrat με τους κλάδους P και R της μεταπτώσεως A – X και  $(v', v'') = (0,0), (1,1), (2,2), (1,0), (2,0)$  για τιμές J'' μεταξύ 0 και 35.
5. Κάθε ένας από τους ακροατές του μαθήματος θα αναλάβει να βρει πληροφορίες για όλες τις γνωστές φασματοσκοπικές σταθερές και άλλες συναφείς πληροφορίες για μία από τις εξής περιπτώσεις:
  - I. Η ταινία Schumann – Runge του O<sub>2</sub> ( $B^3\Sigma_g^- - X^3\Sigma_g^-$ )
  - II. Η ταινία Herzberg του O<sub>2</sub> ( $A^3\Sigma_u^+ - X^3\Sigma_g^-$ )
  - III. Η ταινία του N<sub>2</sub> ( $A^3\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ )