

5^η Σειρά προβλημάτων μαθήματος 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} [A. W. Mantz, J.-P. Maillard, Won B. Roh, and K. Narahari Rao, *J. Mol. Spectrosc.* **157**, 157-159 (1975)].

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 δώσετε την αναλυτική έκφραση των θέσεων των κορυφών για τους κλάδους R και P της δονητικής μεταπτώσεως $(v', v'') = (2, 0)$. Να σχεδιάσετε διάγραμμα Fortrat για αυτούς τους κλάδους μέχρι $J = 120$. Να σχολιάσετε τη μορφή του διαγράμματος.

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 χαρακτηρίστε κάθε κορυφή από άποψη μεταβολής των κβαντικών αριθμών δονήσεως. Θυμηθείτε ότι στο υπέρυθρο ενεργές είναι μόνο οι μεταπτώσεις στις οποίες μεταβάλλεται η διπολική ροπή κατά τη δόνηση.

α/α	Θέση (cm^{-1})	Ένταση	
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	