

6^η Σειρά προβλημάτων μαθήματος Μοριακής Φασματοσκοπίας

1. Δίνονται οι εξής φασματοσκοπικές σταθερές για το μόριο $^{138}\text{Ba}^{127}\text{I}$ στην κατάσταση $X^2\Sigma^+$: $\omega_e = 152.140 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e = 0.2746 \text{ cm}^{-1}$, $B_e = 0.026805878 \text{ cm}^{-1}$. Υπολογίστε (κλασσικώς) την σταθερά δυνάμεως επαναφοράς (k) σε N m^{-1} και την περίοδο δονήσεως (T_v) σε s για $v = 0$. Υπολογίστε την δονητική ενέργεια (E_v) σε cm^{-1} για $v = 0$ και $v = 40$ με $J = 0$. Προσδιορίστε τις παραμέτρους για δυναμικό Morse και από αυτό υπολογίστε τις ακραίες θέσεις της κλασσικής κίνησης του ταλαντωτή (R_{\min} και R_{\max}) για $v = 0$ και $v = 40$.
2. Δίνονται οι φασματοσκοπικές σταθερές του IF: $\omega_e = 610.258 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e = 3.141 \text{ cm}^{-1}$, $B_e = 0.279711 \text{ cm}^{-1}$, $\alpha_e = 0.001874 \text{ cm}^{-1}$. Να υπολογισθούν α) το μήκος του δεσμού και β) οι θέσεις (σε cm^{-1}) των τρίτων κορυφών των κλάδων P και R της θεμελιώδους δονητικής μεταπτώσεως και της πρώτης υπέρτονης.

28/5/2004