

6^η Σειρά Ασκήσεων Μοριακής Φασματοσκοπίας

1. Ποιές από τις παρακάτω μεταπτώσεις διατομικών μορίων είναι απαγορευμένες και εξαιτίας τίνος κανόνα επιλογής: $^1\Pi_g - ^1\Pi_u$, $^1\Delta_u - ^1\Sigma_g^+$, $^3\Phi_g - ^1\Pi_g$, $^4\Sigma_g^+ - ^2\Sigma_u^+$, $^2\Sigma_g^+ - ^3\Sigma_u^+$, $^4\Gamma - ^4\Phi$, $^2\Pi_{3/2} - ^2\Sigma^+$, $^3\Pi_g - ^3\Pi_g$.
2. Για το μόριο ^{63}Cu προσδιορίστηκαν οι ακόλουθες τιμές φασματοσκοπικών σταθερών για την μετάπτωση $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$: $T_e = 21757.619 \text{ cm}^{-1}$, $\omega'_e = 246.317 \text{ cm}^{-1}$, $\omega'_e x'_e = 2.231 \text{ cm}^{-1}$, $B'_e = 0.098847 \text{ cm}^{-1}$, $\alpha'_e = 0.000488 \text{ cm}^{-1}$, $\omega''_e = 266.459 \text{ cm}^{-1}$, $\omega''_e x''_e = 1.035 \text{ cm}^{-1}$, $B''_e = 0.108781 \text{ cm}^{-1}$, $\alpha''_e = 0.000620 \text{ cm}^{-1}$. Να σχεδιασθεί διάγραμμα Fortrat με τους κλάδους P και R για τις δονητικές μεταπτώσεις (v', v''): (0,0), (1,1) και (1,0) για τιμές J μεταξύ 0 και 120. Σε ποιο κλάδο της (0,0) εμφανίζεται κεφαλή, σε ποια τιμή J και σε ποιο κυματαριθμό;

22/6/2007