

2^η Σειρά Ασκήσεων Μοριακής Φασματοσκοπίας

1. Δίνονται τα μήκη δεσμών του βενζολίου $r_{CC} = 1.399 \text{ \AA}$ και $r_{CH} = 1.101 \text{ \AA}$ (CRC Handbook of Chemistry and Physics, 83rd Ed., 9-27). Για τυχαίο άξονα ο οποίος ανήκει στο επίπεδο του μορίου να αποδειχθεί ότι η ροπή αδρανείας έχει σταθερή τιμή. Να υπολογισθούν οι ροπές αδρανείας I_a, I_b, I_c και οι αντίστοιχες φασματοσκοπικές σταθερές περιστροφής A, B, C. Να χαρακτηριστεί ως στρόβος το μόριο και να βρεθεί η διεύθυνση της διπολικής ροπής του. Να υπολογισθεί ο κυματαριθμός της μεταπτώσεως $J = 8 \leftarrow 7, K = 2 \leftarrow 2$.
2. Η χαμηλότερη μετάπτωση του $^1\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ στα μικροκύματα εμφανίζεται στα 88631 MHz, ενώ του $^2\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ στα 72415 MHz. Να υπολογισθούν τα μήκη δεσμών.
3. 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 (κλαστικώς) την σταθερά δυνάμεως επαναφοράς (k) σε N m^{-1} και την περίοδο δόνησεως (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 κλασικής κίνησης του ταλαντωτή (R_{\min} και R_{\max}) για $v = 0$ και $v = 40$.
4. 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 δόνησεως και συμπληρώστε τον πίνακα με την ανάλυση του κυματαριθμού κάθε κορυφής ώστε να φαίνεται η μεταβολή των κβαντικών αριθμών κάθε εμπλεκόμενου τρόπου δόνησεως (π.χ. $\nu_3 + 2 \nu_2$). Θυμηθείτε ότι στο υπέρυθρο ενεργές είναι μόνο οι μεταπτώσεις στις οποίες μεταβάλλεται η διπολική ροπή κατά τη δόνηση.

α/α	Θέση (cm^{-1})	Ενταση	
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	