

1^η Σειρά Ασκήσεων Μοριακής Φασματοσκοπίας

1. Η μετάπτωση του $^{138}\text{Ba } ^1\text{P}_1 - ^1\text{S}$ παρατηρείται στο κενό σε $18060.263 \text{ cm}^{-1}$. Ο χρόνος ζωής της καταστάσεως $^{138}\text{Ba } ^1\text{P}_1$ είναι 8.4 ns και ο βαθμός εκφυλισμού της είναι 3. Υπολογίστε το μήκος κύματος, τη συχνότητα και την ενέργεια του φωτονίου και τις τιμές των συντελεστών Einstein A_{21} , B_{21} , B_{12} , δίνοντας τα αποτελέσματα με τον σωστό αριθμό σημαντικών ψηφίων. Ποια από αυτά τα μεγέθη αλλάζουν στον αέρα και ποιες είναι οι τιμές τους; Ο δείκτης διαθλάσεως n του αέρα σε πίεση 1 atm και θερμοκρασία 15°C δίνεται από τη σχέση

$$(n - 1) \times 10^8 = 8342.54 + \frac{2406147}{130 - \tilde{\nu}^2} + \frac{15998}{38.9 - \tilde{\nu}^2}$$

όπου $\tilde{\nu}$ είναι το αντίστροφο μήκος κύματος μετρημένο σε μm^{-1} . [CRC Handbook of Chemistry and Physics, 83rd Ed., CRC Press, 2002, **10**-224]

2. Άτομα Na βρίσκονται σε φλόγα θερμοκρασίας 2000 K και πίεσεως 1 atm. Να υπολογίσετε τη διεύρυνση μιας συνιστώσας της γραμμής D (589.15788 nm) λόγω φαινομένου Doppler και λόγω πίεσεως (θεωρώντας ότι ο χρόνος μεταξύ συγκρούσεων είναι αντιστρόφως ανάλογος της πίεσεως ώστε να έχουμε διεύρυνση 30 MHz/torr) και να τις συγκρίνετε με την πειραματικά παρατηρούμενη διάσχιση (17 cm^{-1}) της γραμμής D.
3. Υπολογίστε το μήκος κύματος της τρίτης γραμμής της σειράς Brackett του ιόντος Be IV.
4. Δίνονται οι διασχίσεις της γραμμής D ($np \ ^1\text{P}_{1/2} - ns \ ^1\text{S}_{1/2}$) των αλκαλίων:

Άτομο	Z	$\Delta\tilde{\nu} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
H	1	0.365
Li	3	1.7
Na	11	17.19
K	19	58
Rb	37	245
Cs	55	554

Σχεδιάστε τις τιμές σε διάγραμμα και εξετάστε αν υπάρχει απλή εμπειρική σχέση μεταξύ Z και $\Delta\tilde{\nu}$.

5. Δίνονται οι μεταπτώσεις του $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ για $J = 1 - 0$, 48990.978 MHz, $J = 2 - 1$, 97980.950 MHz, $J = 3 - 2$, 146969.033 MHz και $J = 4 - 3$ 195954.226 MHz. Να θεωρήσετε ότι η ενέργεια περιστροφής του μορίου περιγράφεται επαρκώς με την βοήθεια των σταθερών B_e και D_e , να γράψετε την έκφραση για τις ενεργειακές διαφορές (μεταπτώσεις) και να προσδιορίσετε τις φασματοσκοπικές σταθερές με προσαρμογή ελαχίστων τετραγώνων σε αυτή την έκφραση. Τέλος να υπολογίζετε το μήκος δεσμού του μορίου.

12/12/2012