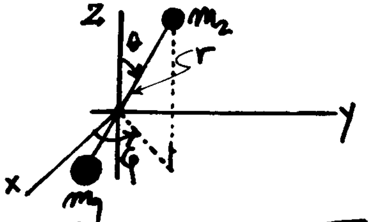
Περιστροφεύς σταθερού μήκους

(Διατομικό μόριο του οποίου το μήκος του δεσμού θεωρείται σταθερό)

Σύμφωνα με τά προηγούμενα είναι προφανές ότι τό πρόβλημα ανάγεται σέ κίνηση σωματιδίου επί σφαίρας σταθεράς ακτίνος (όση καί του περιστροφέως) αλλά οι μάζες m_1 καί m_2 αντικαθίστανται μέ τήν ανηγμένη μάζα μ, Σχ. 9



Σχ. 9. Τό κέντρο βάρους είναι η αρχή των αξόνων.

Έχουμε
$$\hat{H} = -\hbar^2/2\mu\, \nabla^2$$
καί εάν χρησιμοποιήσουμε πολικές συντεταγμένες η Χαμιλτωνιανή γράφεται (Εξ. (28α), σ. 46)
$$\hat{H} = -\hbar^2/2\mu \left(1/r^2\, \hat{\Lambda}^2(\theta,\phi) \right)$$

Γνωρίζουμε όμως ότι οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστού $\hat{\Lambda}^2$ είναι οι σφαιρικές αρμονικές μέ ιδιοτιμές $-l(l+1)$, άρα
$$\hat{\Lambda}^2(\theta,\phi)\, Y_{lm_l}(\theta,\phi) = -l(l+1)\, Y_{lm_l}(\theta,\phi)$$
καί
$$\hat{H}\, Y_{lm_l}(\theta,\phi) = +\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\, Y_{lm_l}(\theta,\phi)$$

Αντικαθιστώντας τό l μέ J (χρησιμοποιούμε τό σύμβολο

l στό ἄτομο) ἔχουμε

$$E_J = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}, \quad J=0,1,2\ldots \qquad (38)$$

ὅπου $I=\mu r_0^2$ ἡ ροπή ἀδρανείας τοῦ συστήματος.
Ἀπό τήν ἔκφραση ἐνεργείας τοῦ περιστροφέως εἶναι φανερές ὅτι
(i) Ἔχουμε ἐκφυλισμό βαθμοῦ $g=2J+1$· σέ κάθε E_J ἀντιστοιχοῦν $2J+1$ ἰδιοσυναρτήσεις Y_{JM_J}, $M_J=-J,-J+1,\ldots 0,\ldots J$.
(ii) Τό σύστημα δέν ἔχει ἐνέργεια μηδενός, ἡ $E_0=0$ (ἡ E_0 εἶναι καί ἡ μοναδική μή ἐκφυλισμένη κατάστασις).
Ἡ συχνότης ν μεταξύ γειτονικῶν καταστάσεων, σύμφωνα μέ τήν σχέση (38) εἶναι

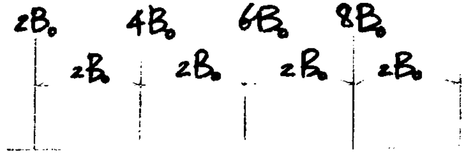
$$\nu = \frac{E_{J+1}-E_J}{h} = \frac{(J+1)(J+2)-J(J+1)}{h(2I)}\hbar^2 = 2(J+1)B_0 \qquad (39)$$

ὅπου

$$B_0=\frac{h}{8\pi^2 I} \quad \text{(σταθερά περιστροφῆς, μονάδες } s^{-1}\text{)} \qquad (40)$$

Μέ κανόνα ἐπιλογῆς $\Delta J=\pm 1$ (+ ἀπορρόφηση, − ἐκπομπή) τό φάσμα (ἀπορροφήσεως) ἐκ περιστροφῆς διατομικοῦ μορίου ὅπου ἡ ἐνδοατομική ἀπόστασις r θεωρεῖται σταθερά (καί τό πείραμα δείχνει ὅτι ἡ ὑπόθεσις αὐτή οὐσιαστικῶς ἰσχύει), ἀποτελεῖται ἀπό σειρά ἰσαπεχουσῶν κατά $2B_0$ γραμμῶν. Πράγματι, ἀπό τήν σχέση (39) μέ $J=0,1,2,3,\ldots$ παίρνουμε τίς ἀντίστοιχες συχνότητες $\nu_0=2B_0$ $\nu_1=4B_0$, $\nu_2=6B_0\ldots$ δηλ. οἱ διαφορές $\Delta\nu$ μεταξύ γειτονικῶν γραμμῶν εἶναι ἀκριβῶς $2B_0$ (ὑπενθυμίζουμε ὅτι $r=$σταθερά)

Τὰ προηγούμενα ἀπεικονίζονται στὸ ἀκόλουθο Σχῆμα 10



Σχ. 10 Φάσμα τῆς περιστροφῆς (μικροκυμάτων) διατομικοῦ μορίου· ἡ ἐνδοατομικὴ ἀπόστασις r θεωρεῖται σταθερά.

Ἀπὸ τὸ πειραματικὸ φάσμα περιστροφῆς μετρῶντας τὴν ἀπόσταση μεταξὺ τῶν γειτονικῶν γραμμῶν ἀπορροφήσεως βρίσκουμε τὴν σταθερὰ B_o καὶ ἀκολούθως τὴν ἐνδοατομικὴ ἀπόσταση r (ὑποθέτουμε βεβαίως ὅτι ἡ ἀνηγμένη μᾶζα τοῦ συστήματος εἶναι γνωστή, γνωρίζουμε δηλ. τὸ μόριο τοῦ ὁποίου τὸ φάσμα κατεγράψαμε)
Ὁ πίνακας ποὺ ἀκολουθεῖ μᾶς δίνει τὶς συχνότητες ἀπορροφήσεως σὲ MHz τοῦ περιστροφικοῦ φάσματος τοῦ μονοξειδίου τοῦ ἄνθρακος, $^{12}C^{16}O$

J → J+1	ν (MHz)	Δν (MHz)
0 → 1	115 271.20	
1 → 2	230 537.97	115 266.77
2 → 3	345 795.9	115 257.9
3 → 4	461 040.7	115 244.8
4 → 5	576 267.8	115 227.1

Τὸ γεγονὸς ὅτι τὸ $\Delta\nu$ ($=2B_o$) δὲν παραμένει σταθερὸ ἀλλὰ μεταβάλλεται ἐλαφρῶς ὀφείλεται στὴν μεταβολὴ τῆς ἀποστάσεως r μὲ τὴν περιστροφὴ τοῦ μορίου. Καθὼς δὲ τὸ r αὐξάνει τὸ I μεγαλώνει ἀναλόγως καὶ ἡ ποσότης B_o μειοῦται.