

Wstęp do Optyki i Fizyki Materii Skondensowanej

zadania domowe - seria 2

Zadanie 1

Dla pewnej cząsteczki dwuatomowej, znajdującej się w podstawowym stanie elektronowym, stała rotacyjna B zależy od stanu oscylacyjnego: dla $v = 0$ wynosi B_0 , zaś dla $v = 1$ wynosi $B_1 = 0.8 B_0$. Wiedząc, że energia oscylacji wynosi $\hbar\omega_0$, wyznacz energie dozwolonych przejść elektrycznych dipolowych $v=0 \rightarrow v=1$ dla pierwszych dziesięciu poziomów rotacyjnych. Naskicuj położenia obserwowanych linii absorpcyjnych w skali energii fotonów. Wyznacz odległości w skali energii obserwowanych linii w gałęziach P i R. Dla uproszczenia rachunków przyjmij $\hbar\omega_0 = 100 \text{ cm}^{-1}$, $B_0 = 1 \text{ cm}^{-1}$.

Zadanie 2

W widmie absorpcyjnym cząsteczki $^1\text{H}^{19}\text{F}$ zaobserwowano między innymi następujące, kolejne, linie związane z dipolowymi przejściami oscylacyjno-rotacyjnymi (gałąź R i P): 503.2 meV, 508.6 meV, 519.4 meV i 524.8 meV. Linie te mają energie najbliższe E_{osc} , gdzie E_{osc} jest różnicą energii między sąsiednimi poziomami oscylacyjnymi. Na podstawie tych danych znaleźć:

a) wartość E_{osc} ,

b) moment bezwładności cząsteczki,

Wskazówka: $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$, $k_B = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$.

Zadanie 3

Długość wiązania cząsteczki $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ wynosi $1.27 \text{ \AA}$. W przybliżeniu sztywnego rotatora znaleźć dla tej cząsteczki:

a) stałą rotacyjną,

b) energie czterech najniższych poziomów rotacyjnych,

c) energie wszystkich obserwowanych linii absorpcyjnych związanych z optycznymi przejściami dipolowymi między tymi czterema poziomami,

d) względne obsadzenia rozpatrywanych w punkcie b) poziomów w temperaturze $T = 300 \text{ K}$.

Zadanie 4

Znajdź energie promieniowania występującego w widmie rotacyjnym cząsteczki heterojądrowej o stałej rotacyjnej B , uwzględniając wpływ siły odśrodkowej, która modyfikuje energie poziomu

rotacyjnego odpowiadającego liczbie kwantowej J o wartość $-DJ^2(J+1)^2$, gdzie $D = \frac{4B^3}{\hbar^2\omega^2}$.

Zadanie 5

Cząsteczki dwuatomowe są zazwyczaj słabiej związane w elektronowych stanach wzbudzonych niż w stanie podstawowym. Oznacza to, że równowagowa odległość jąder $R_{\text{podst}} < R_{\text{wzb}}$, a zatem stałe rotacyjne wiąże nierówność $B_{\text{podst}} > B_{\text{wzb}}$. Rozważ widmo elektronowo-oscyłacyjno-rotacyjne, odpowiadające przejściu między stanem podstawowym Σ a stanem wzbudzonym Π , ograniczone do przejścia $v_{\Sigma} = 0 \rightarrow v_{\Pi} = 0$. Przyjmując najprostsze wyrażenia na energię poziomów oscylacyjno-rotacyjnych w obu stanach elektronowych

$$E = E_i + \omega_i \left(v_i + \frac{1}{2}\right) + B_i J_i(J_i + 1), \quad i = \Sigma, \Pi,$$

wykaż, że dla dwóch gałęzi rotacyjnych częstości linii maleją monotonicznie, podczas gdy dla trzeciej gałęzi częstości linii przechodzą przez maksimum, poza którym nie ma już widma (tzw. głowica pasma). Dla której gałęzi ma to miejsce? Jakiej wartości liczby kwantowej J_{Σ} odpowiada linia o największej częstości?