

Wstęp do Optyki i Fizyki Materii Skondensowanej (atomy wieloelektronowe i cząsteczki)

Zadanie 1

Całkowita energia potencjalna jonu H_2^+ osiąga minimum dla odległości między jądrami równej $2a_B$. Hamiltonian jonu zapisać przy założeniu nieskończonej masy jąder (przybliżenie Bohra-Oppenheimera). Metodą wariacyjną oszacować energię stanu podstawowego cząsteczki H_2^+ zakładając, że funkcja falowa jest w postaci $\psi(r) = a \psi_{100}^{(1)} + b \psi_{100}^{(2)}$, gdzie funkcje $\psi_{100}^{(1)}$ i $\psi_{100}^{(2)}$ są funkcjami stanu podstawowego elektronu związanego z pierwszym lub drugim jądrem. Wskazówka: przy obliczaniu całek zawierających funkcje $\psi_{100}^{(1)}$ i $\psi_{100}^{(2)}$ skorzystać ze współrzędnych eliptycznych $\lambda = (r_1 + r_2)/R$, $\mu = (r_1 - r_2)/R$, element objętości ma wówczas postać $dV = 1/8 R^3 (\lambda^2 - \mu^2) d\lambda d\mu d\varphi$, $1 \leq \lambda \leq \infty$, $1 \leq \mu \leq -1$, φ jest kątem azymutalnym wokół wektora R .

Zadanie 2 (do domu)

Znaleźć energię stanu podstawowego E_0 i energię jonizacji E_j atomu helo-podobnego o liczbie atomowej Z traktując oddziaływanie kulombowskie pomiędzy elektronami jako zaburzenie (czyli w zerowym przybliżeniu elektrony nie oddziałują ze sobą). Założyć, że jądro atomu jest nieruchome, pominąć w hamiltonianie układu wyrazy związane ze spinem elektronów.

Zadanie 3

Dla cząsteczki KLi w stanie $B^1\Pi$ stała rotacyjna wynosi $B_e = 0.2057 \text{ cm}^{-1}$, natomiast częstość oscylacji 135.8 cm^{-1} . Zależć klasyczną częstość rotacji cząsteczki oraz stałą siłową. $\mu_{KLi} = 9.9 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$.

Zadanie 4

Wyznaczyć absorpcyjne widmo rotacyjne cząsteczki HCl dla której $B_e = 10.4 \text{ cm}^{-1}$.

Zadanie 5

Znaleźć zależność obsadzeń poszczególnych poziomów rotacyjnych cząsteczki HCl od temperatury. Wyznaczyć wartość L odpowiadającą maksimum rozkładu.

Zadanie 6

Naszkiecować schemat widma oscylacyjno-rotacyjnego cząsteczki HCl. $B_e = 10.4 \text{ cm}^{-1}$, $h\nu_e = 2885 \text{ cm}^{-1}$. Rozważyć przejścia ze stanu $v=0$ do $v=1$.

Zadanie 7.

W widmie absorpcyjnym pewnej cząsteczki zaobserwowano między innymi następujące linie związane z dipolowymi przejściami oscylacyjno-rotacyjnymi (gałąź R i P): 2843 cm^{-1} , 2865 cm^{-1} , 2906 cm^{-1} , 2926 cm^{-1} . 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) stałą rotacyjną cząsteczki,
 - c) moment bezwładności, zakładając, że cząsteczka jest sztywnym rotatorem,
- Wskazówka: $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 6.6 \cdot 10^{-13} \text{ meVs}$

Zadanie 8.

Długość wiązania cząsteczki $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ wynosi 1.19Å . W przybliżeniu sztywnego rotatora znaleźć dla tej cząsteczki:

- stałą rotacyjną,
- energie czterech najniższych poziomów rotacyjnych,
- energie wszystkich obserwowanych linii absorpcyjnych związanych z optycznymi przejściami dipolowymi między tymi czterema poziomami,
- względne obsadzenia rozpatrywanych w punkcie b) poziomów w temperaturze pokojowej. (300K).

Zadanie 9 (do domu)

Krzywą energii potencjalnej podstawowego stanu elektronowego cząsteczki $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ można przybliżyć potencjałem Morse'a:

$$E(R) = D \left[1 - e^{-b(R-R_e)} \right]^2$$

Gdzie $R_e = 1.3\text{Å}$ jest równowagową odległością jąder, parametr $b = 2\text{Å}^{-1}$, a stała $D = 5\text{eV}$

Naszkicuj wykres tego potencjału. Rozwijając potencjał w przybliżeniu harmonicznym i zakładając, że cząsteczka jest sztywnym rotatorem:

- znaleźć różnicę energii między sąsiednimi poziomami oscylacyjnymi E_{osc}
- znaleźć stałą rotacyjną
- policzyć energię czterech linii absorpcyjnych związanych z dipolowymi przejściami oscylacyjno-rotacyjnymi (gałąź R i P), których energie są najbliższe E_{osc} .

Atomowa jednostka masy wynosi $u = 1.66 \times 10^{-27}\text{kg}$, $\hbar = 1.06 \cdot 10^{-34}\text{Js} = 6.6 \cdot 10^{-16}\text{eVs}$

Zadanie 10 (do domu)

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

- wartość E_{osc} ,
- stałą rotacyjną cząsteczki,
- moment bezwładności, zakładając, że cząsteczka jest sztywnym rotatorem,
- odległość jąder.

Masa protonu wynosi: $m_p = 1.67 \times 10^{-27}\text{kg}$, $\hbar = 1.055 \times 10^{-34}\text{Js} = 6.59 \times 10^{-16}\text{eVs}$.