

Opgaven week 4 – Molecuulfysica A1 voor Technische Natuurkunde

Opdracht 1 – Rotatie spectra

Voorspel welke van de volgende moleculen een puur rotatie microgolf absorptie spectrum kunnen produceren: H_2 , HCl , CH_4 , CH_3Cl , CH_2Cl_2 .

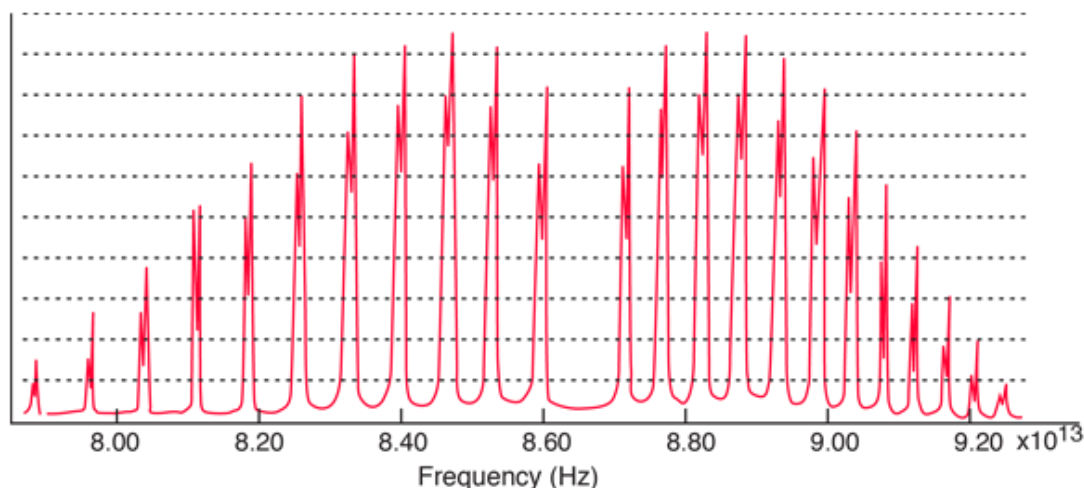
Opdracht 2 – Resolutie van een elektronische transitie en rotatie transitie

Een geëxciteerde elektronische staat heeft typisch een natuurlijke levensduur van 10 ns. Een typische natuurlijke levensduur voor een moleculaire rotatie is 10^3 s.

- (a) Gebruikmakend van de Heisenberg relatie (zie slides), wat is de onzekerheid van de energie van de transitie naar de grondtoestand voor beide gevallen?
- (b) Druk de twee spreidingen in energie gevonden in (a) uit in golfgetallen.
- (c) Welke invloed hebben de genoemde spreidingen in energie/golfgetal op de pieken geassocieerd met deze transities in een spectrum?
- (d) Een spectraallijn van een gas gemeten bij $T=0\text{K}$ en bij extreem lage druk heeft een breedte van 1.0 cm^{-1} . Bereken de natuurlijke levensduur van de energietoestand geassocieerd met deze spectraallijn.
- (e) Een spectraallijn van een gas gemeten bij $T=0\text{K}$ en bij extreem lage druk heeft een breedte van 100 MHz. Bereken de natuurlijke levensduur van de energietoestand geassocieerd met deze spectraallijn.

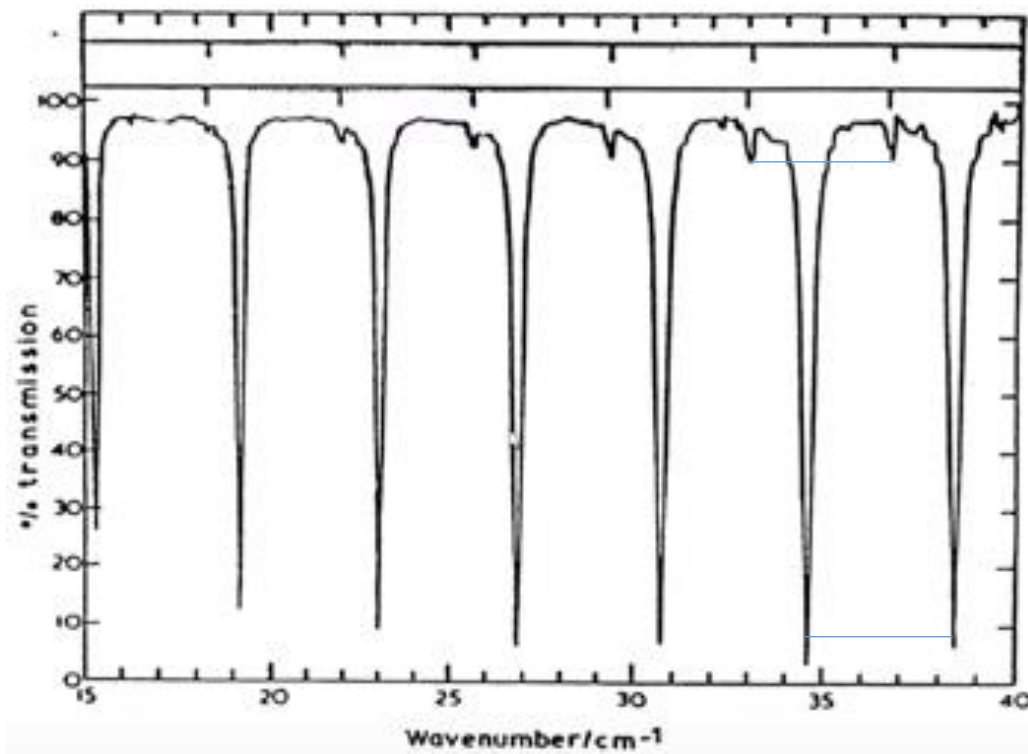
Opdracht 3 – HCl rotatie spectrum

Gegeven is het spectrum van een HCl molecuul



- (a) Inspecteer de afstanden tussen de spectraallijnen. Neemt deze afstand toe of af bij toenemend golfgetal? Wat zegt dit over de relatie tussen rotatie energie en de bondlengte van het HCl molecuul? (Negeer het gat rond 8.65 Hz).
- (b) Geef de relatie tussen de kinetische energie en hoeksnelheid van het roterend HCl molecuul. Wat is de trend tussen de hoeksnelheid van het HCl molecuul en zijn bondlengte?
- (c) Geef op basis van je antwoord in (b) een fysische verklaring voor je observatie in antwoord (a).

Opdracht 4 – Atomic weights $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ en $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$



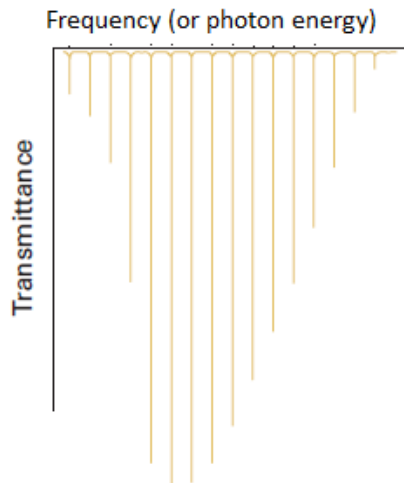
- (a) Geef de expressie voor de afstand in termen van de rotatieconstante tussen de spectraallijnen in het CO spectrum dat is weergegeven.
- (b) Hebben $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ en $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ dezelfde gereduceerde massa's? Roteert $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ hetzelfde als $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$? Leg uit.
- (c) Het spectrum bij deze vraag bestaat uit een mengsel van $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ en $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. Bepaal de ratio van de gereduceerde massa's van $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ en $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ aan de hand van dit spectrum, onder de aanname dat de bondlengtes voor beide isotopen gelijk zijn.

Opdracht 5

- (a) Bereken de frequentie van de spectraallijn veroorzaakt door de transitie van $J=2$ naar $J=3$ in een rotatiespectrum van $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. De bondlengte is 112,81 pm.
- (b) De spectraallijn veroorzaakt door de transitie van $J=0$ naar $J=1$ in $^1\text{H}^{81}\text{Br}$ is gemeten bij 16.93 cm^{-1} . Onder de aanname dat dit molecuul een rigide rotor is, wat is het hoekmoment I van dit molecuul, en wat is de bond lengte?

***Opdracht 7 – Populaties rotatie energieën, het rotatie spectrum (4 punten).**

Gegeven is een schets van een rotatie spectrum van een lineaire rotor:



- (a) Door welke transitie is de 6^e spectraallijn in dit spectrum (die maximale intensiteit heeft) veroorzaakt? (1/2 punt)
- (b) Leg uit welk energie level van het lineaire molecuul dat hoort bij dit rotatie spectrum de hoogste populatie heeft. (1/2 punt)

De populatie van een rotatie energie level J is gegeven door de Boltzmann expressie:

$$N_J \propto N g_J e^{-E_J/kT}$$

- (c) Wat is N_J , N , g_J en E_J ? geef de expressies voor E_J en g_J (voor de lineaire rotor). (1 punt)
- (d) Leg uit dat het J energie level met de maximale populatie (oftewel de maximale waarde van N_J) bepaald kan worden door $\frac{dN_J}{dJ} = 0$ te bepalen. Laat zien dat $J_{max} = \sqrt{\frac{kT}{2hcB}} - \frac{1}{2}$ (1 punt).
- (e) De rotatieconstanten van een gas in een interstellar dust cloud zijn bekend. Welke eigenschap (grootheid) van deze interstellar dust cloud kan bepaald worden door de spectraallijn met sterkste absorptie uit het rotatiespectrum te bepalen? (1 punt).

Opdracht 8 – Niet rigide rotor

Geef aan bij elk statement of deze juist of onjuist is voor een niet-rigide rotor.

Als de rotatie toeneemt,

- (a) neemt de bondlengte toe.
- (b) neemt het hoekmoment toe.
- (c) neemt de rotatieconstante toe.