

Вращательная спектроскопия. Домашнее задание.

Финенко Артем

2016/28/10

Задача 7.1.

$$\begin{aligned} & {}^6\text{LiF} \\ E_r^{(1)} &= B J(J+1) \Big|_{J=1} = 2B \\ E_r^{(2)} &= B J(J+1) \Big|_{J=0} = 0 \\ \Delta E_r = 2B &\implies B = \frac{\Delta E_r}{2} = 1.497 \text{ cm}^{-1} \\ l &= \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 c \mu B}} = 1.57 \text{ \AA} \end{aligned}$$

Задача 7.2.

Предполагаем, что длины связи в ${}^6\text{LiF}$ и ${}^7\text{LiF}$ совпадают.

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{h}{8\pi^2 c \mu_1 l^2} \implies B_2 = \frac{h}{8\pi^2 c \mu_2 l^2} = B_1 \frac{\mu_1}{\mu_2} \\ B_1 &= 89740.46 \text{ MHz} \implies B_2 = 79997.21 \text{ MHz} \end{aligned}$$

Задача 7.5.

Изначально поместим начало отсчета в атом Н молекулы цианоацетилена и определим положение центра масс.

$$x_{COM} = \frac{\sum_i m_i x_i}{\sum_i m_i} = 3.00 \text{ \AA}$$

В системе отсчета, связанной с центром масс, найдем главные компоненты тензора инерции.

$$I_{aa} = \sum_i m_i (y_i^2 + z_i^2) = 0$$

$$I_{bb} = \sum_i m_i (x_i^2 + z_i^2) = 1.8597 \cdot 10^{-45} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$$

$$I_{cc} = \sum_i m_i (x_i^2 + y_i^2) = I_{bb}$$

$$I_{bb} = I_{cc} > I_{aa} = 0$$

Найдем вращательную постоянную B .

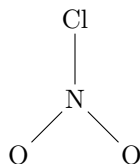
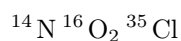
$$B = \frac{h}{8\pi^2 c I} = 0.1505 \text{ cm}^{-1} = 4.513 \text{ GHz}$$

Задача 7.6.

	$I_{aa}, \text{kg} \cdot \text{m}^2$	$I_{bb}, \text{kg} \cdot \text{m}^2$	$I_{cc}, \text{kg} \cdot \text{m}^2$	B, GHz
CO ₂	0	$7.65 \cdot 10^{-46}$	$7.65 \cdot 10^{-46}$	10.967
OCS	0	$1.459 \cdot 10^{-45}$	$1.459 \cdot 10^{-45}$	5.749
O ¹³ CS	0	$1.464 \cdot 10^{-45}$	$1.464 \cdot 10^{-45}$	5.731
CS ₂	0	$2.71 \cdot 10^{-46}$	$2.71 \cdot 10^{-46}$	3.085

Замена ¹²C на ¹³C приводит к изменению вращательной постоянной только в случае OCS.

Задача 7.8.



Определяем положение центра масс и относительно него вычисляем координаты атомов. Затем определяем главные компоненты тензора инерции и вращательные постоянные.

	$I_{aa}, \text{kg} \cdot \text{m}^2$	$I_{bb}, \text{kg} \cdot \text{m}^2$	$I_{cc}, \text{kg} \cdot \text{m}^2$	A, GHz	B, GHz	C, GHz
NO ₂ Cl	$1.614 \cdot 10^{-45}$	$6.336426 \cdot 10^{-46}$	$2.248106 \cdot 10^{-45}$	5.198	13.244	3.733