

Задание 2

Энергии и термы атомов и молекул

1. Энергии колебательных уровней двухатомной молекулы с учетом ангармонизма:

- записать выражение с учетом ангармонизма,
- найти энергию возбуждения из основного колебательного состояния в первое $[\text{см}^{-1}]$ на примере молекулы HCl:

круговая частота $2\pi\nu = 5.6 \times 10^{14} \text{ с}^{-1}$, константа ангармонизма $x_e = 0.02$.

2. Вращательные уровни энергии двухатомной молекулы:

- записать выражение, указать смысл параметров,
- найти характерный масштаб расстояний между соседними уровнями $[\text{см}^{-1}]$ на примере молекулы N_2 : вращательная постоянная $B = 2.0 \text{ см}^{-1}$.

3. Для двухатомной молекулы с массами ядер m_1 и m_2 найти температуру, при которой средняя кинетическая энергия поступательного движения равна энергии возбуждения вращательного уровня с $J = 5$, посчитать на примере молекулы CO (межъядерное расстояние $d = 0.113 \text{ нм}$).

4. Длины волн двух соседних линий в чисто вращательном спектре λ_1 и λ_2 $[\text{мкм}]$.

На примере молекулы HCl ($\lambda_1 = 117 \text{ мкм}$ и $\lambda_2 = 156 \text{ мкм}$) найти вращательную постоянную B $[\text{см}^{-1}]$ и определить, между какими уровнями происходят переходы с λ_1 и λ_2 .

Спектроскопия поглощения

5. Через кювету с газом двухатомных молекул пропускают монохроматический лазерный пучок, длина волны которого настроена на колебательно-вращательный переход с сечением поглощения $\sigma = 10^{-18} \text{ см}^2$. Для молекул с колебательной частотой $\nu = 1000 \text{ см}^{-1}$ и вращательной постоянной $B = 1.5 \text{ см}^{-1}$ для нижнего уровня с $\nu = 0$, $J = 15$ оценить:

- долю молекул на этом уровне при температуре 300 K,
- коэффициент поглощения газа при давлении 20 мбар,
- мощность лазерного излучения, прошедшего кювету длиной 15 см, при падающей мощности 50 мВт.

Спектроскопия возбуждения флуоресценции

6. Сфокусированный лазерный пучок диаметром 0.5 мм с мощностью 1 мВт (длина волны 620 нм) по нормали пересекает молекулярный пучок диаметром 1 мм. Поглощающие молекулы (сечение поглощения $\sigma = 10^{-16} \text{ см}^2$) движутся со средней скоростью $5 \cdot 10^4 \text{ см/с}$, а плотность потока молекул равна $10^{12} \text{ мол}/(\text{с} \cdot \text{см}^2)$. Излучение флуоресценции молекул собирается из области пересечения пучков объемом $2 \cdot 10^{-4} \text{ см}^3$, которая отображается с помощью линзы диаметром 50 мм, расположенной на расстоянии 100 мм от этой области, на фотокатод с квантовой эффективностью 20%.

Пренебрегая процессами тушения флуоресценции, оценить скорость счета фотоэлектронов ФЭУ.

Фотоакустическая спектроскопия

7. Лазерное излучение мощностью 1 Вт периодически, в течение 10^{-2} с , направляется в кювету с газом длиной 10 см и объемом 50 см^3 , с плотностью числа поглощающих молекул (сечение поглощения $\sigma = 10^{-16} \text{ см}^2$) $2.5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Молекулы имеют 3 поступательных и 3 вращательных степени свободы. Пренебрегая излучательными переходами, оценить амплитуды прироста давления в кювете и сигнала микрофона при чувствительности микрофона 10 мВ/Па.

Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР)

8. Непрерывное возбуждающее лазерное излучение $\lambda = 515$ нм, мощность 5 Вт (Ar^+ -лазер) фокусируется в рассеивающий объем $1 \text{ мм}^2 \times 5 \text{ мм}$. Сечение комбинационного рассеяния детектируемых молекул $\sigma = 10^{-30} \text{ см}^2$.

Эффективность сбора сдвинутого по частоте рассеиваемого излучения на ФЭУ - 15%, квантовая эффективность фотокатода ФЭУ - 20%, темновой ток ФЭУ - 10 фотоэлектрон/с. Оценить минимально обнаружимую концентрацию детектируемых молекул $[\text{мол/см}^3]$, положив минимальное отношение сигнал/шум равным 2.

9. КР возбуждают в образце с числом 10^{22} КР-активных молекул в объеме $1 \text{ мм}^2 \times 5 \text{ мм}$ непрерывным лазерным излучением: $\lambda = 488$ нм, мощность 8 Вт (Ar^+ -лазер). Сечение комбинационного рассеяния молекул $\sigma = 10^{-29} \text{ см}^2$, частота КР-активного колебания 1500 см^{-1} , поглощения возбуждающего и рассеянного излучения молекулами нет. Оценить выделяемую в объеме образца тепловую мощность [Вт].

Спектроскопия когерентного антистоксова рассеяния света (КАРС)

10. В схеме неколлинеарного КАРС расстояние между пучками накачки диаметром 4 мм на фокусирующей линзе с $f = 200$ мм составляет 16 мм.

Оценить продольное и поперечное пространственное разрешение (характерные размеры области зондирования).