



---

**Лабораторная работа 5.2.3**  
**Исследование спектра поглощения паров йода**

---

**Студенты:**  
Панченко Наталья  
Исламов Сардор  
Физтех-школа физики и исследований им. Ландау  
Московский Физико-Технический Институт

27 октября 2023 г.

**Аннотация.** В работе измерен спектр поглощения паров йода, выделены серии электронно-колебательных переходов, определены параметры потенциала межъядерного взаимодействия в двухатомной молекуле йода.

## Теоретическое введение

Двухатомная молекула является сложной многочастичной устойчивой системой, состоящей из двух ядер и некоторого количества электронов. Задача о движении электронов и ядер в молекуле решается разбиением на подзадачи: движение электронов в электростатическом поле неподвижных ядер и движение самих ядер в некотором эффективном потенциале, вид которого зависит от распределения электронов.

**Вращательные уровни.** Запишем одночастичную задачу:

$$-\frac{\hbar}{2\mu}\Delta\Psi(\vec{\rho}) + U^{eff}(\vec{\rho})\Psi(\vec{\rho}) = E\Psi(\vec{\rho}) \quad (1)$$

где  $\mu$  - приведенная масса.

Перепишем это выражение в сферических координатах и разделим переменные:

$$\Psi(\vec{\rho}) = \psi(\vec{\rho})Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (2)$$

где  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  - сферическая функция, целые числа  $m, l$  определяют конкретный вид угловой волновой функции.

$$\Delta_{\theta,\phi}Y_l^m(\theta, \phi) = -l(l+1)Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3)$$

Собственные значения определяют спектр энергии вращательного движения. Спектр оказывается зависящим только от орбитального числа  $l$ , и он определяет спектр энергетических уровней (терм) вращательного движения.

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu\rho^2} \quad (4)$$

**Колебательные уровни.** В качестве самого простого приближения используем выражение:

$$U^{eff}(\rho) = \frac{\kappa(\rho - \rho_0)^2}{2} + U_0 \quad (5)$$

где  $\kappa \sim \frac{2Ry}{r_B^2}$ ,  $Ry \approx 13,6eV$ ,  $r_B \approx 0,053nm$ .

Получим спектр:

$$E_{flu} = \hbar\omega_{flu}(n + \frac{1}{2}) \quad (6)$$

**Потенциал Морзе.** Одним из модельных потенциалов для зависимости  $U^{eff}(\rho)$  которая позволяет учесть явления ангармонизма колебаний и диссоциации молекулы, является потенциал Морзе.

$$E = D - A + \hbar\omega_{flu}(n + \frac{1}{2}) - \frac{1}{4A}(\hbar\omega_{flu}(n + \frac{1}{2}))^2 \quad (7)$$

Разность между соседними уровнями:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_{flu} - \frac{\hbar^2\alpha^2}{\mu}(n+1) = \hbar\omega_{flu}\left(1 - \frac{\hbar\omega_{flu}}{2A}(n+1)\right) \quad (8)$$

Выражение для вторых разностей:

$$\Delta^2 E_n = \Delta E_{n+1} - \Delta E_n = -\frac{(\hbar\omega_{flu})^2}{2A} \quad (9)$$

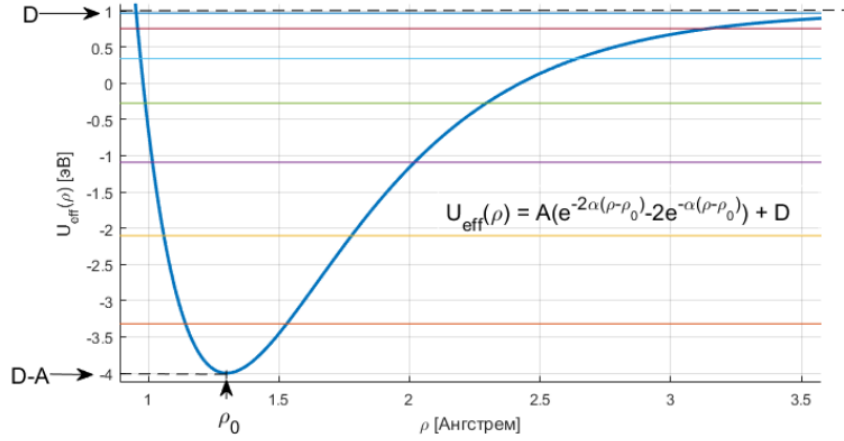
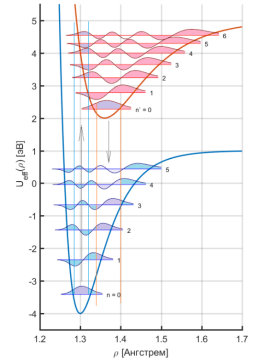


Рис. 1: Потенциал Морзе

**Излучательные переходы между термами и принцип Франка-Кондона.** Различные состояния электронной подсистемы соответствуют различным электронным термам молекулы. Переходы между электронными термами могут сопровождаться электромагнитным излучением на частотах вблизи видимого диапазона. Точное значение частоты излучения определяется не только электронными термами начального и конечного состояний молекулы, но ещё и соответствующими колебательными и вращательными термами.



## Экспериментальная установка

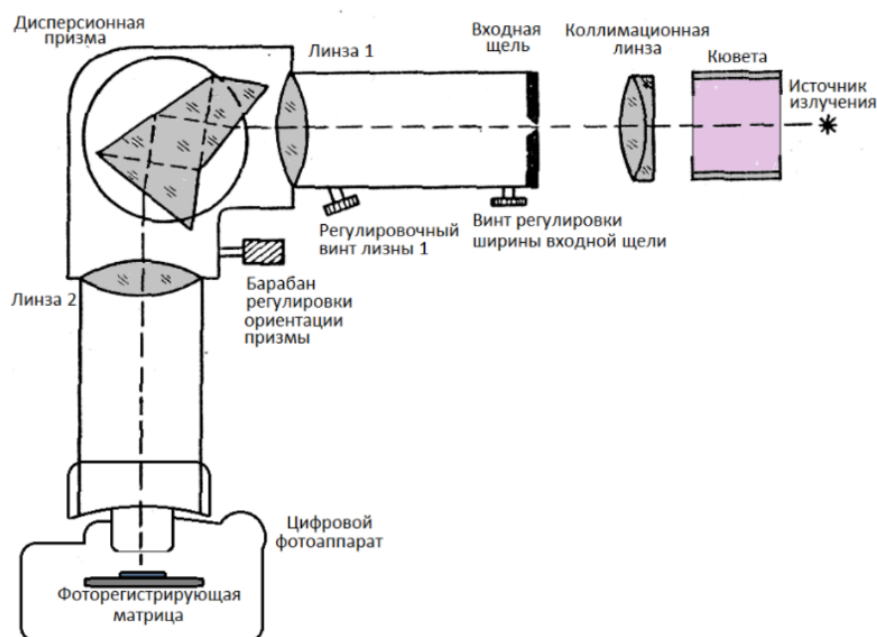


Рис. 2: Экспериментальная установка

Установка для измерения спектров включает в себя оптическую скамью, источники излучения (газоразрядную ртутную лампу и лампу накаливания), кювету с парами йода, фокусирующую линзу и монохроматор с установленным на нём цифровым зеркальным фотоаппаратом. Источники излучения, кювета и линза устанавливаются на оптической скамье, которая жёстко соединена с корпусом монохроматора. Излучение подаётся через коллимационную линзу на входную щель монохроматора, и пройдя через линзы и призму, фокусируется на плоскости светочувствительной матрицы фотоаппарата.

## Ход работы

**Калибровка.** Установим взаимнооднозначное соответствие между длиной волны и пикселем на изображении спектра ртутной лампы. таким образом мы теперь умеем получать из пикселя длину волны.

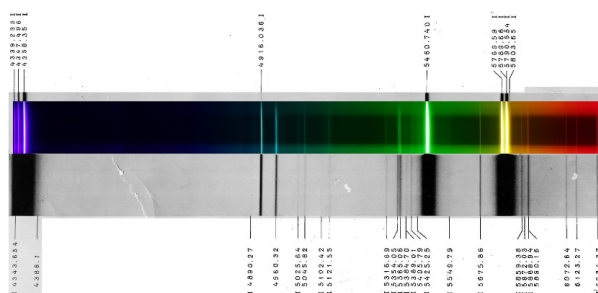


Рис. 3: Спектр ртути

**Обработка данных.** Заменяем ртутную лампу лампой накаливания, установим кювету с парами йода и снимем его спектр поглощения.

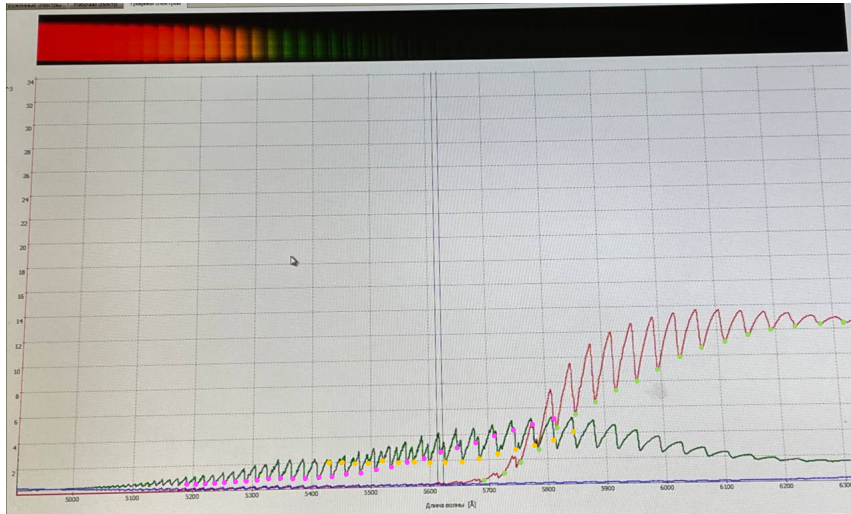


Рис. 4: Спектр поглощения паров йода

По полученным данным определим основные параметры электронно-колебательных термов.

Для каждой серии рассчитаем значения первых разностей уровней энергии  $\Delta E_{n_m} = E_m(n+1) - E_m(n)$  и построим их зависимость от номера в серии (рис. 5)

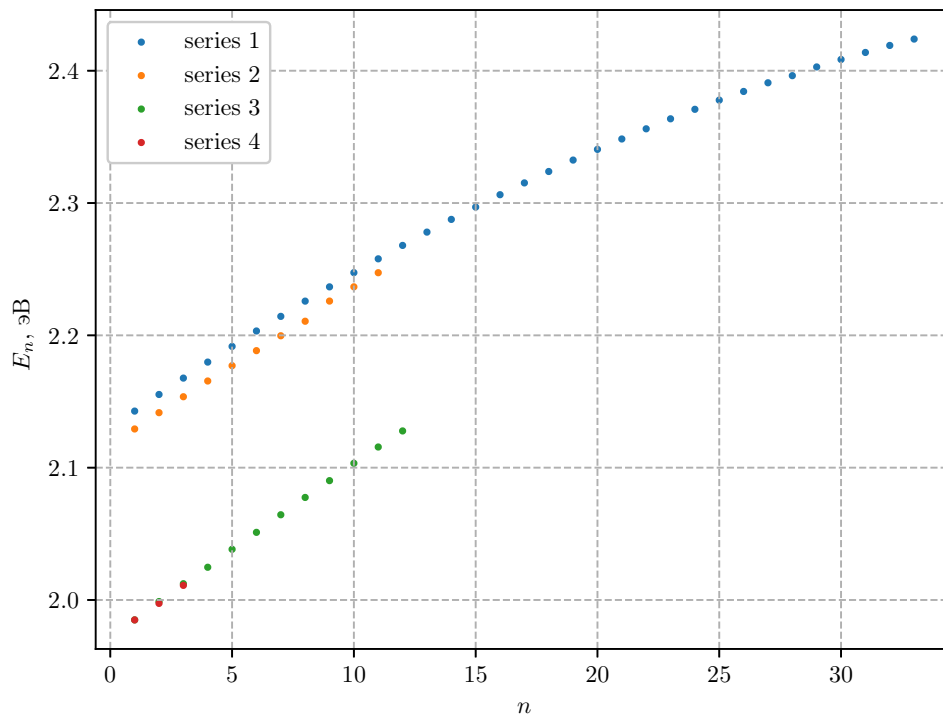


Рис. 5: Серии переходов

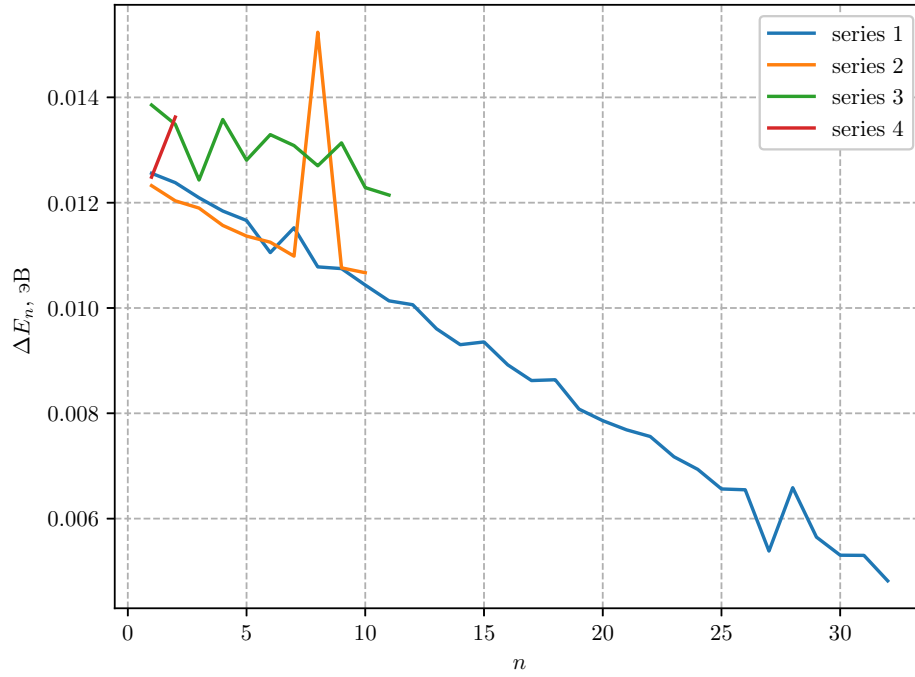


Рис. 6: Зависимость первых разностей от номера

Подберем значения индексов смещений линий поглощения так, чтобы их первые разности легли на одну прямую. При этом смещение для серии с минимальной энергией будет равно нулю (рис. 6 и рис. 7)

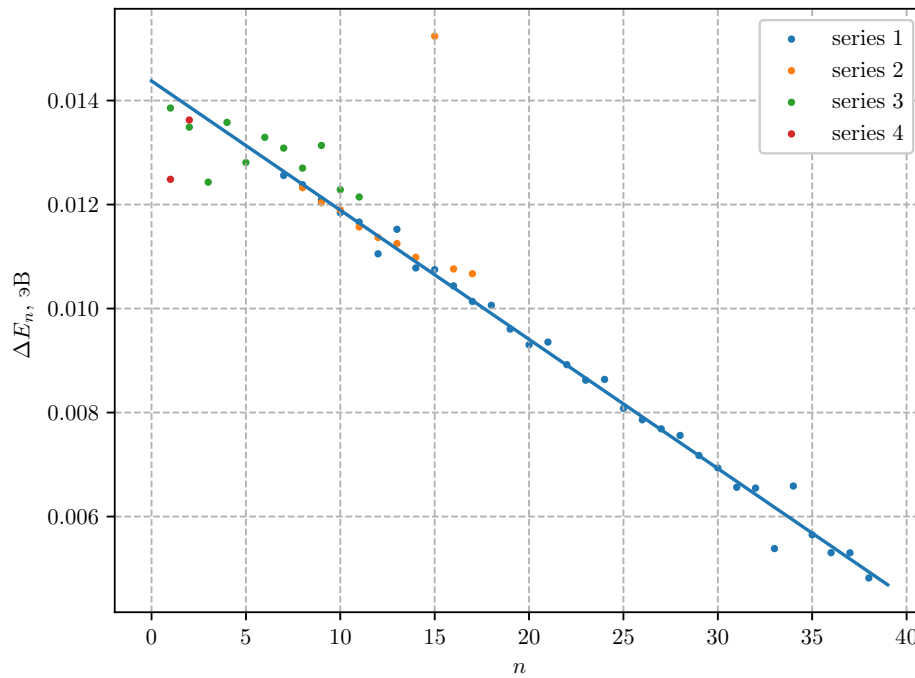


Рис. 7: Первые разности с учетом смещения линий

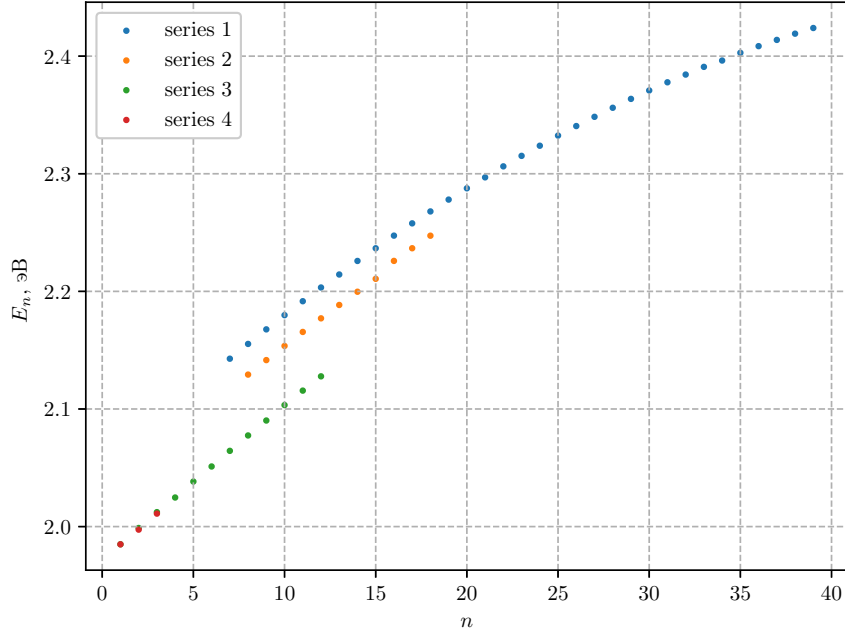
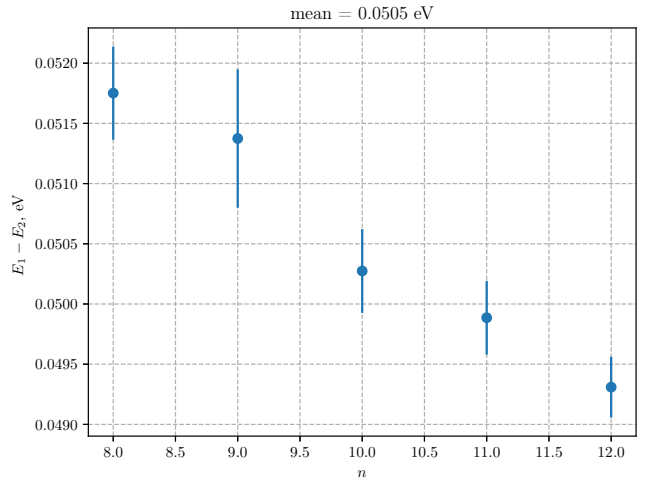
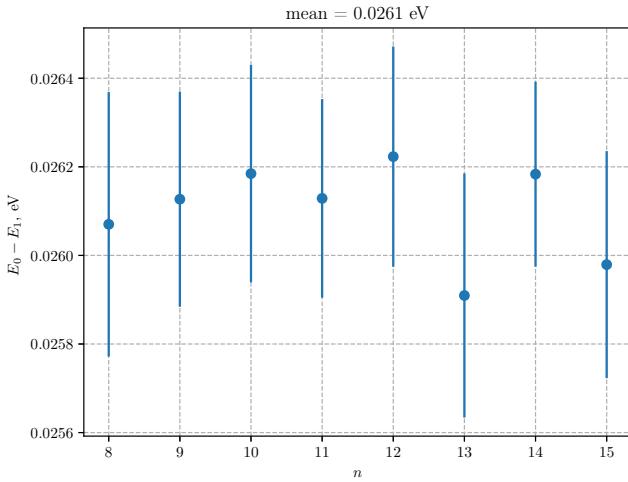


Рис. 8: Серии переходов с учетом смещения линий

Убедимся, что в областях перекрытия разности значений энергии перехода разных серий отличаются несильно.



Как видно из графиков, разница для 1 и 2 серии вдвое больше разницы для 0 и 1 серии. Из этого может следовать, что была пропущена промежуточная серия переходов. Для учета этого будем считать, что между 1 и 2 серией примерно на равных расстояниях от них присутствует еще одна серия.

Из среднего значения всех этих разностей получаем  $\Delta E_{vib.,gr} = (25.5 \pm 1.2) \cdot 10^{-3}$  эВ.

Построим зависимость вычисленного среднего от номера серии. Так как данная зависимость должна быть линейной, заменим две точки (одну из которых мы фиктивно добавили) на одну промежуточную (рис. 9)

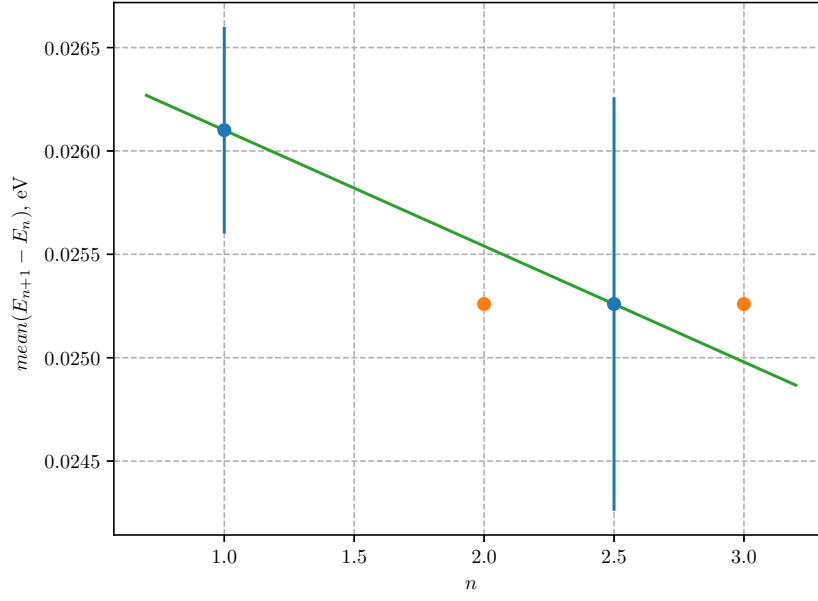


Рис. 9: График средней разности для соседних пар серий

Из наклона этой прямой вычислим  $\Delta^2 E_{gr} = (-2.5 \pm 0.7) \cdot 10^{-4}$  эВ.

Найдем величину энергии между дном основного электронного терма и дном возбуждённого электронного терма  $\Delta E_{el,ex}$ . Аппроксимируем 1 серию переходов параболой (рис. 10) для нахождения коэффициентов:

$$E_n^{(1)} = W_0 \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 + W_1 \left( n + \frac{1}{2} \right) + W_2$$

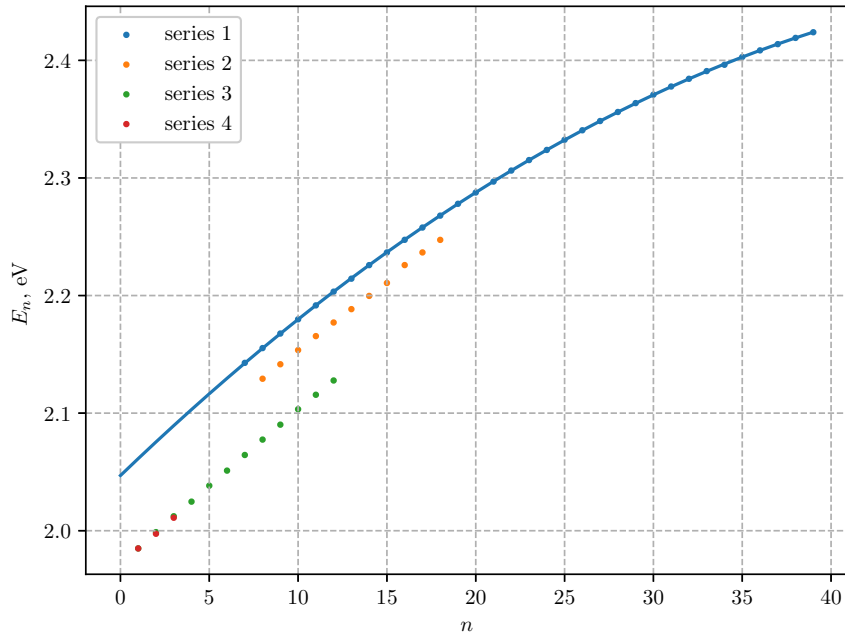


Рис. 10: Аппроксимация первой серии параболой



Получаем, что  $W_0 = -1.25 \cdot 10^{-4}$  эВ,  $W_1 = 1.47 \cdot 10^{-2}$  эВ,  $W_2 = 2.04$  эВ.

$$\Delta E_{el,ex} = W_2 + \frac{\Delta E_{vib.,gr}}{2} = 2.05 eV$$

Расчитаем параметры потенциала Морзе:

$$\alpha_{gr} = \frac{\sqrt{-\mu \Delta^2 E_g r}}{\hbar} = (1.9 \pm 0.3) \cdot 10^{10} m^{-1}$$

Оценим также число  $N_{gr}$  колебательных уровней основного электронного терма:

$$E_N = D - A + \hbar \omega_e \left( N + \frac{1}{2} \right) - \frac{(\hbar \omega_e)^2}{4A} \left( N + \frac{1}{2} \right)^2 \approx D \Rightarrow N + \frac{1}{2} = \frac{\Delta E}{\Delta^2 E} N_{gr} = (102 \pm 30)$$

Определим энергию диссоциации основного терма:

$$\Delta E_{dis.} = D - (D - A) = A = \frac{1}{2} \frac{(\Delta E)^2}{\Delta^2 E} \Rightarrow \Delta E_{dis.,gr} = (1.3 \pm 0.5) \text{ эВ}$$

## Выводы

В ходе работы был получен спектр поглощения паров йода и параметры потенциала Морзе:

$$\Delta E_{vib.,gr} = (25.5 \pm 1.2) \cdot 10^{-3} \text{ эВ}, \Delta E_{vib.,gr}^{table} = 26.5 \cdot 10^{-3} \text{ эВ};$$

$$\Delta E_{el,ex} = 2.05 \pm 0.08 \text{ эВ};$$

$$\alpha_{gr} = \frac{\sqrt{-\mu \Delta^2 E_g r}}{\hbar} = (1.9 \pm 0.3) \cdot 10^{10} m^{-1};$$

$$\Delta E_{dis.,gr} = (1.3 \pm 0.5) \text{ эВ}.$$

Также произведена оценка числа колебательных уровней основного электронного терма

$$N_{gr} = 102 \pm 30$$