

Московский физико-технический институт
Факультет молекулярной и химической физики

Лабораторная работа №13
по курсу

Физические методы исследований

**«Изучение электронно-колебательных
спектров поглощения двухатомных
молекул на примере молекулы I_2 »**

Выполнили:
студенты 3 курса
642 группы ФМХФ
Демьянов Георгий
Шадымов Владимир

Москва 2019

Аннотация

В этом отчёте изложены результаты выполнения лабораторной работы «Изучение электронно-колебательных спектров поглощения двухатомных молекул на примере молекулы I_2 ». Приводится краткая теория молекулярных спектров, рассматриваются особенности спектра поглощения молекулярного йода в диапазоне температур $T = 300 \div 350$ К, приводится описание экспериментальной установки и методики регистрации спектров при различных температурах. Исследуется электронно-колебательно-вращательный спектр поглощения паров йода. Спектр поглощения, исследуемый в работе, соответствует электронному переходу $^1\Sigma_g^+$ и лежит в области длин волн $490 \leq \lambda \leq 650$ нм.

Цель работы: изучение структуры электронно-колебательно спектра поглощения двухатомных молекул, определение из спектроскопических данных основных молекулярных постоянных с использованием статистических методов обработки результатов эксперимента на ЭВМ.

1. Теоретическое введение

При соединении атомов в молекулы их электронные оболочки объединяются. Электромагнитные поля, возникающие в процессе образования молекулы при сближении электронных оболочек атомов, уже не являются сферически симметричными, как в атоме. Появление новых степеней свободы движения частиц молекулы отражается на структуре её энергетических уровней и, следовательно, на структуре молекулярного спектра. Наличие в молекуле двух и более положительно заряженных ядер существенно усложняет рассмотрение поведения системы заряженных частиц. Если в атоме с помощью квантовой механики рассматривается распределение вероятности нахождения электронов в поле только одного ядра, то в случае молекулы необходимо рассматривать как распределение вероятности нахождения электронов в поле двух и более ядер, так и вероятность нахождения ядер в пространстве относительно заданной системы координат.

Из всех свойств атомов и молекул наиболее важно знание их внутренней энергии E . Фундаментальным уравнением, связывающим энергию системы с её волновой функцией Ψ , является стационарное уравнение Шредингера:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (1)$$

где \hat{H} — оператор полной энергии (гамильтониан). Для того, чтобы теоретически определить возможные стационарные энергетические состояния системы частиц (атома, молекулы, иона) и затем по ним рассчитать спектры или термодинамические функции, необходимо составить для системы оператор Гамильтона \hat{H} и решить уравнение (1). Однако точно в аналитическом виде уравнение Шредингера решается только для простейших модельных систем, например, гармонического осциллятора, жёсткого ротатора и некоторых других. Для молекулы уравнение Шредингера настолько усложняется, что его точное аналитическое решение возможно только для простейшей двухатомной молекулы — иона при фиксированном положении ядер. Однако бурное развитие вычислительной техники и создание всё более совершенных и мощных ЭВМ в последнее время дало новый импульс квантовомеханическим расчётам молекулярных состояний. В дальнейшем изложении мы будем ограничиваться в основном наиболее простым случаем двухатомной молекулы, для которой теория молекулярных спектров наиболее полно разработана.

Для большинства практических задач молекулярной спектроскопии достаточно точным является приближённое представление полной волновой функции молекулы в виде произведения

$$\Psi = \Psi_e \Psi_v \Psi_r, \quad (2)$$

где индексы e, v, r относятся соответственно к движению электронов, колебательному движению ядер и к вращательному движению молекулы как целого. Это позволяет решать уравнение Шредингера (1) отдельно для электронной, колебательной и вращательной волновых функций. В приближении (2) полную внутреннюю энергию молекулы можно представить в виде суммы

$$E = E_e + E_v + E_r, \quad (3)$$

где E_e - энергия электронной оболочки молекулы, E_v - энергия колебаний ядер молекулы, E_r - энергия вращения молекулы. Разделение полной волновой функции по типу (2), а следовательно, и разделению энергии молекулы на сумму энергий отдельных видов движения возможно при условии

$$E_e \gg E_v \gg E_r \quad (4)$$

что в большинстве случаев выполняется.

2. Экспериментальная установка

Рис. 1. Установка для

3. Обработка результатов измерений

3.1. Обработка результатов

4. Заключение

В данной работе рассматривалось