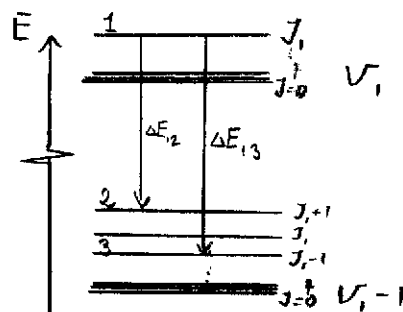


Givet: HCL's vib.-rot. spektrum innehåller våglängderna
 $\lambda = 3,43 \mu\text{m}$ och $\lambda = 3,48 \mu\text{m}$ svarande mot
 övergångarna $\Delta v = -1$ (vibration), $\Delta J = \pm 1$ (rotation)

Sökt: a) Vilken av våglängderna svarar mot $\Delta J = +1$
 b) Beräkna "effektiva" fjäderkonstanten för HCL

Lösning

Energispektrum



Tillstånd	Kvanttal	
	v	J
1	v_1	J_1
2	v_1-1	J_1+1
3	v_1-1	J_1-1

$$a) \Delta E = hf = \frac{hc}{\lambda}$$

$\Rightarrow$ Liten energiskillnad $\Leftrightarrow$ stor våglängd

$\therefore$ Övergången med $\Delta v = -1$ och $\Delta J = +1$
 svarar mot $\lambda_{12} = 3,48 \mu\text{m}$

b) Vibrationer

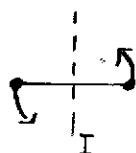


Reducerad massa

$$\mu = \frac{M_1 \cdot M_2}{M_1 + M_2}$$

$\Rightarrow$ Vibrationsenergin $E_v = (v + \frac{1}{2}) \hbar \omega_0$ där $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

Rotationer



Rotationsenergin

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$$

Energierna för de aktuella tillstånden

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= (v_1 + \frac{1}{2}) \hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I} J_1(J_1+1) \\ E_2 &= (v_1 - \frac{1}{2}) \hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I} (J_1+1)(J_1+2) \\ E_3 &= (v_1 - \frac{1}{2}) \hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I} (J_1-1)J_1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} \Delta E_{12} = E_1 - E_2 = \hbar \omega_0 - \frac{\hbar^2}{2I} 2(J_1+1) = \frac{hc}{\lambda_{12}} \\ \Delta E_{13} = E_1 - E_3 = \hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I} 2J_1 = \frac{hc}{\lambda_{13}} \end{cases}$$

$$\Rightarrow 2\hbar \omega_0 - \frac{\hbar^2}{I} = hc \left(\frac{1}{\lambda_{12}} + \frac{1}{\lambda_{13}} \right)$$

$$\text{Men } \hbar \omega_0 \gg \frac{\hbar^2}{I} \quad (\Delta E_{\text{vib}} \gg \Delta E_{\text{rot}})$$

$$\Rightarrow \omega_0 \approx \frac{\hbar 2\pi c}{2\hbar} \left(\frac{1}{\lambda_2} + \frac{1}{\lambda_3} \right)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

För HCl

$\uparrow \quad \uparrow$
 $A=1 \quad A=\begin{cases} 35 \\ 37 \end{cases}$ 2 isotoper, Antag $\bar{A}=36$

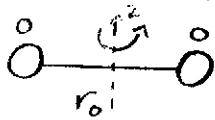
$$\Rightarrow \mu_{\text{HCl}} = \frac{1 \cdot 36}{1+36} m_N$$

$\uparrow$
 $\approx 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

$$\therefore k = \left[c\pi \left(\frac{1}{\lambda_2} + \frac{1}{\lambda_3} \right) \right]^2 \frac{36}{37} m_N \approx 484 \text{ N/m}$$

K4

O₂ - molekyl



Givet: $r_0 = 2,0 \text{ \AA}$

$$E_J = k_B T \quad (\text{rotationsenergi})$$

där $T = 300 \text{ K}$

- Sökt: a/ I - tröghetsmoment mot z-axeln
b/ Rotationskvanttalet J

Lösning

a/ Tröghetsmoment

$$I \equiv \sum_i m_i r_i^2 = 16 m_N \left[\left(\frac{r_0}{2} \right)^2 + \left(\frac{r_0}{2} \right)^2 \right] = 8 m_N r_0^2 \approx 5,3 \cdot 10^{-46} \text{ (kg m}^2\text{)}$$

$\uparrow$
 $1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ (nukleonmassa)

b/ $E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = k_B T$

$$\Rightarrow J^2 + J - \frac{2I k_B T}{\hbar^2} = 0 \quad \Rightarrow J = -\frac{1}{2} \left(\pm \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2I k_B T}{\hbar^2}} \right) = \dots = 19,5$$

Svar: $J = 19$ eller 20