

Задача 11 (автор Дильмухамбетов Е.Е.)

1. При переходе $J \rightarrow J + 1$ энергия перехода:

$$E_{J+1} - E_J = B_0(J+1)(J+2) - B_0J(J+1) = 2B_0(J+1)$$

Частота поглощения:

$$\nu_{J \rightarrow J+1} = \frac{2B_0}{h}(J+1)$$

2. $\lambda = 1$ см.

$$E[\text{Дж}] = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \times 3 \cdot 10^{10} \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}}{1 \text{ см}} = 1,99 \cdot 10^{-23} \text{ Дж},$$

$$E[\text{Дж/моль}] = E[\text{Дж}]N_A = 12,0 \text{ Дж/моль}.$$

3. Разность между соседними пиками поглощения во вращательном спектре постоянна:

$$(E_{J+2} - E_{J+1}) - (E_{J+1} - E_J) = 2B_0(J+2) - 2B_0(J+1) = 2B_0$$

Среднее значение B_0 по трем пикам:

$$B_0 = \frac{\left(\frac{164,00 - 123,15}{2} + \frac{123,15 - 82,19}{2} \right)}{2} = 20,45 \text{ см}^{-1} = 4,065 \cdot 10^{-22} \text{ Дж}.$$

Приведенная масса:

$$\mu_{\text{HF}} = \frac{m_{\text{H}} m_{\text{F}}}{m_{\text{H}} + m_{\text{F}}} = \frac{0,001 \cdot 0,019}{0,020} = 9,5 \cdot 10^{-4} \text{ кг/моль} = 1,58 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$$

$$r_0 = \sqrt{\frac{h^2}{8\pi^2 \mu B_0}} = \sqrt{\frac{(6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с})^2}{8\pi^2 \times 1,58 \cdot 10^{-27} \text{ кг} \times 4,065 \cdot 10^{-22} \text{ Дж}}} = 9,30 \cdot 10^{-11} \text{ м} = 0,93 \text{ \AA}.$$

4. Энергия переходов обратно пропорциональна приведенной массе:

$$\frac{E_{\text{DF}}}{E_{\text{HF}}} = \frac{\mu_{\text{HF}}}{\mu_{\text{DF}}} = \frac{19/20}{19 \cdot 2/21} = 0,525$$

а) $82,19 \cdot 0,525 = 43,15 \text{ см}^{-1}$, изотопный сдвиг $E_{\text{HF}} - E_{\text{DF}} = 39,04 \text{ см}^{-1}$;

б) $123,15 \cdot 0,525 = 64,65 \text{ см}^{-1}$, изотопный сдвиг $E_{\text{HF}} - E_{\text{DF}} = 58,50 \text{ см}^{-1}$;

в) $164,0 \cdot 0,525 = 86,1 \text{ см}^{-1}$, изотопный сдвиг $E_{\text{HF}} - E_{\text{DF}} = 77,90 \text{ см}^{-1}$.

5. Тепловая энергия меньше энергии первого перехода:

$$kT \leq E_1 - E_0 = 2B_0$$

$$T \leq \frac{2B_0}{k} = \frac{2 \cdot 4,065 \cdot 10^{-22} \text{ Дж}}{1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}} = 58,9 \text{ К}.$$