

## Задача 11.

Квантовомеханическое рассмотрение вращения двухатомной молекулы приводит к простой формуле для вращательных уровней энергии:

$$E_J = \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1) = B_0 J(J+1),$$

где  $J = 0, 1, 2, 3, \dots$  - вращательное квантовое число;

$h = 6.626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с - постоянная Планка;

$I = \mu r_0^2$  - момент инерции молекулы;

$\mu = m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$  - приведенная масса молекулы;

$m_1, m_2$  - массы атомов;

$r_0$  - межъядерное расстояние;

$B_0$  - вращательная постоянная, выраженная в единицах энергии (Дж).

Вращательные переходы, которые происходят только между соседними состояниями с поглощением или испусканием электромагнитного излучения, регистрируются в виде вращательных спектров в микроволновом диапазоне.

1. Выведите общую формулу для расчета частот поглощения в чисто вращательном спектре двухатомной молекулы. (Частота перехода связана с разницей энергий соотношением Планка:  $h\nu = \Delta E$ ).
2. В спектроскопии для измерения энергии используют специальную единицу - «обратный сантиметр» ( $\text{см}^{-1}$ ). Один обратный сантиметр соответствует энергии света с длиной волны 1 см. Выразите  $1 \text{ см}^{-1}$  в Дж и в Дж/моль.
3. Ниже приведены положения трех соседних пиков поглощения из вращательного спектра HF:  $82.19 \text{ см}^{-1}$ ,  $123.15 \text{ см}^{-1}$ ,  $164.00 \text{ см}^{-1}$ . Определите: (а) вращательную постоянную (в  $\text{см}^{-1}$ ); (б) межъядерное расстояние в молекуле фтороводорода.
4. Рассчитайте изотопные сдвиги (в  $\text{см}^{-1}$ ) в приведенных в п. 3 частотах поглощения фтороводорода при замещении водорода на дейтерий.
5. Средняя энергия теплового движения при температуре  $T$  равна  $kT$  ( $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К - постоянная Больцмана). Если эта энергия меньше энергии перехода на первый вращательный уровень, то все молекулы находятся на нулевом уровне и не вращаются. Определите температуру, ниже которой молекулы фтороводорода не вращаются.