

(Подготовительный комплект МХО-2010)

Структуру простых молекул определяют с помощью спектроскопии. Вращательные спектры молекул наблюдаются в дальней ИК или микроволновой области. На рис. 1 изображен вращательный спектр молекулы H^{35}Cl .

Согласно простой модели вращающейся двухатомной молекулы, вращательная энергия E_J дискретна и зависит от вращательного квантового числа:

$$E_J = BJ(J+1), \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

$B = \frac{h^2}{8\pi^2\mu R_e^2}$ – вращательная постоянная, μ – приведенная масса, R_e – межъядерное расстояние. При микроволновом облучении в молекуле происходят переходы с вращательного уровня J'' на вращательные уровни J' , которые удовлетворяют правилу отбора:

$$J' - J'' = 1.$$

Рассчитайте межъядерное расстояние, R_e , в молекуле H^{35}Cl .

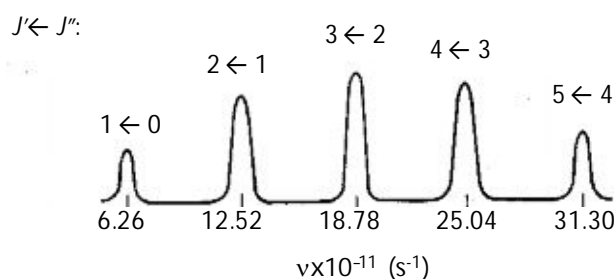


Рис. 1. Вращательный спектр молекулы H^{35}Cl

Другие задачи

1. Вращательная постоянная молекулы N_2 равна $B = 2.00 \text{ cm}^{-1}$. Определите равновесное расстояние между атомами азота в этой молекуле.
2. У какой молекулы вращательная постоянная наибольшая? Рассчитайте ее значение в cm^{-1} , если ковалентный радиус соответствующего атома равен 37.0 пм.
3. Пользуясь данными, приведенными на этой странице, рассчитайте длину волны, соответствующую переходу $J'' = 2 \rightarrow J' = 3$ в молекуле H^{37}Cl .
4. Колебательная частота в молекуле H_2 равна 4401 cm^{-1} , а в молекуле D_2 – 3115 cm^{-1} . Рассчитайте молярную массу D_2 . Чему равна колебательная частота в HD ?
5. Используя данные, приведенные на этой странице, рассчитайте длины волн в спектре поглощения H_2 , соответствующие разрешенным колебательно-вращательным переходам с уровня ($\nu'' = 2, J'' = 3$). К какой области электромагнитного спектра относятся эти длины волн?
6. Одна из линий в ИК спектре поглощения H_2 соответствует длине волны 2639 нм. Определите вращательные квантовые числа этого перехода. Что можно сказать про колебательные квантовые числа и почему?

Ответы

МХО-2010 $R_e = 1.28 \text{ \AA}$.

1. $R_e = 1.097 \text{ \AA}$.
2. H_2 . $B = 61.1 \text{ cm}^{-1}$.
3. $\lambda = 160 \text{ мкм}$.
4. $M = 4.0241 \text{ г/моль}$. $\omega(\text{HD}) = 3813 \text{ cm}^{-1}$.
5. $(v'' = 2, J'' = 3) \rightarrow (v' = 3, J' = 4)$, $\lambda = 2045 \text{ нм}$
 $(v'' = 2, J'' = 3) \rightarrow (v' = 3, J' = 2)$, $\lambda = 2479 \text{ нм}$
6. $J'' = 5, J' = 4$. Колебательные квантовые числа определить невозможно, так как в рамках модели гармонического осциллятора всем переходам $v'' \rightarrow v' = v'' + 1$ соответствует одна и та же колебательная частота.