

Problema 3

La frequenza vibrazionale di una molecola AB di massa ridotta $\mu = 3$ a.m.u. nel suo stato elettronico fondamentale è 2500 cm^{-1} . La molecola viene eccitata dallo stato $v_F = 0$ dello stato elettronico fondamentale allo stato $v_E = 0$ del primo stato elettronico eccitato con radiazione elettromagnetica di 35000 cm^{-1} .

- a) Se la transizione di diseccitazione più probabile vale 25000 cm^{-1} , qual'è il valore v_F più probabile?
- b) Supponendo di poter descrivere lo stato fondamentale con un potenziale armonico, quanto vale la differenza ΔR fra le distanze interatomiche di equilibrio dello stato elettronico fondamentale e quello eccitato?

Problema 4

Un gas di molecole biatomiche ha uno spettro di assorbimento di cui si riportano le energie di alcune righe in cm^{-1} : 971.6, 962.8, 953.6, 944.0, 934.0, 988.0, 995.6, 1002.8, 1009.6, 1016.0, 1022.0. Trascurando le correzioni al rotatore rigido, si chiede

- a) di determinare tutti i parametri fisici che si possono estrarre dallo spettro;
- b) a che temperatura la riga d'intensità massima corrisponde al numero quantico rotazionale $K=7$;
- c) a temperatura ambiente valutare qual'è la massima energia in cm^{-1} che si può osservare nello spettro roto-vibrazionale, considerando popolati i livelli tali che $E/k_B T \approx 1$.