

Fisica Atomica e Molecolare A.A. 2018/2019
Lapto di esonero del 03/06/2019

①

Problema 1

Dalle righe osservate nello spettro si osservano
che $B = 9 \text{ cm}^{-1}$; $\nu_0 = 2560 \text{ cm}^{-1}$

Inoltre $\mu = \frac{K}{(2\pi c \nu_0)^2} \approx 0.946 \text{ a.m.u.}$

$$e \quad R_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{4\pi\mu c B}} = 1.4 \text{ \AA}$$

Se uno dei due atomi che formano la molecola
è l'idrogeno e che

$$\mu = \frac{m_H m_X}{m_H + m_X} \Rightarrow m_X = \frac{\mu m_H}{m_H - \mu}$$

$$m_X \approx 17.5 \text{ a.m.u.}$$

Diunque la molecola in questione è il radicale
idrossile OH

Infine, sostituendo l'atomo di idrogeno con uno
di ossigeno si ottiene uno spettro con i seguenti
parametri fici:

$$B^{OD} = B^{OH} \frac{\mu^{OH}}{\mu^{OD}} \approx 4.7 \text{ cm}^{-1}; \quad \nu_0^{OD} = \nu_0^{OH} \sqrt{\frac{\mu^{OH}}{\mu^{OD}}} \approx 1856 \text{ cm}^{-1}$$

Problema 2

(2)

$$D_0 = D_e - \frac{\hbar \omega_0}{2} \quad \text{con } D_0 = 2.48 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow \frac{\nu_0}{2} = 282.3 \text{ cm}^{-1} \quad \text{e } \mu = 17.725 \text{ a.m.u.}$$

Derivando due volte il potenziale di Morse V le
 $K = 2\alpha^2 D_e$. A partire dal valore di ν_0
si ottiene la costante di forza K

$$K = \mu (2\pi c \nu_0)^2 \approx 333 \frac{\text{J}}{\text{m}^2}$$

$$\Rightarrow \alpha = \sqrt{\frac{K}{2D_e}} = 2.03 \text{ \AA}^{-1}$$

Applicando la seguente legge di dispersione

$$\hbar \omega_k = -D_e + \hbar \omega_0 \left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{4} \right) + B k(k+1) \quad (*)$$

$$\text{con } \beta = \frac{\hbar \omega_0}{4D_e} \approx 0.007 \quad (\text{trascurabile})$$

[nel seguito, termini di
distorsione centrifuga al potenziale
sono trascurati]

si ottengono i seguenti risultati

$$\nu_1 = -20002 \text{ cm}^{-1}; \quad \nu_2 \approx -20001 \text{ cm}^{-1}; \quad \nu_3 \approx -20000 \text{ cm}^{-1}$$

$$(*) \quad B = \frac{\hbar}{4\pi \mu c R_0^2} \approx 0.24 \text{ cm}^{-1}$$

Infine secondo la distribuzione di Boltzmann si ha

(3)

$$\frac{N_{\nu, k}}{N_{\nu, 0}} = (2k+1) e^{-\frac{B k(k+1)}{k_B T}}$$

I rapporti richiesti sono

a) ≈ 3 ; b) ≈ 7 ; c) trascurabile