

Teszt kérdések. Két atomos molekulák tanulmányozása infravörös spektroszkópiával

1. Értelmezd az alábbi fizikai mennyiségek közötti összefüggéseket, majd az **analógia értelmében írjuk fel forgómozgás esetére tárgyalt mennyiségeket!** Nevezzük meg a képletekben szereplő összes mennyiséget! A betűjelölések megegyeznek a fizikában használatos jelölésekkel. A **félkövér betűtípussal (bold)** jelzett mennyiségek vektormennyiségek.

Forgómozgás

$$m\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{p} = m\mathbf{v} \quad (0.1)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m\mathbf{a} \quad (0.2)$$

$$T = E_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \quad (0.3)$$

$$\hat{T} = ? \dots \quad (0.4)$$

- Értelmezd a polár-koordináták (rajz) fogalmát és add meg ezen koordinátákkal a térfogatelem (dV) értékét!
- Írd fel a Schrödinger-egyenletet a (kvantummechanikai) merev rotátorra, és értelmezd a benne szereplő mennyiségeket!
- Egy molekula összenergiáját milyen specifikus energiák összegeként adhatjuk meg? Értelmezd ezeket!
- Hogyan számoljuk egy két tömegű ($m_1 < m_2$) rendszer redukált tömegét? Értékben melyik tömeghez áll közelebb? Próbáljuk meg matematikailag a választ alátámasztani!
- Mit értünk a hullámszám fogalmán? Milyen mértékegységekben mérhetjük?
- A merev rotátor rotációs energiája! Értelmezzük, hogy milyen mennyiségektől függ, és mért mondjuk, hogy ez az energia kvantált?
- Rotációs állandó (B) értéke! Milyen értékeket vehet fel a rotációs kvantumszám (J)? Mit értünk foton abszorpció és emisszió alatt? Hogyan változhat a J értéke?
- Írjuk fel az $F(J)$ spektrális tényezőt, és ábrázoljuk az értékeit $J=6$ -ig! Rajzoljuk fel a lehetséges átmeneteket, és értékben adjuk meg kibocsátott fényhullámcsomagok hullámszámát, ha nem vesszük figyelembe a centrifugális hatást!
- Mit értünk centrifugális hatás fogalmán a két atomos molekula forgása esetén?
- Molekula rezgése esetén, hogyan írunk fel a rendszert jellemző Hamilton-operátort?
- Értelmezd a molekula rezgési energiáját (összefüggés/képlet, magyarázat)! Hogyan adható meg az alaprezgési frekvencia értéke (amikor $v=0$)!
- Értelmezd az alábbi CO-ra felvett IR spektrumot! Írd fel a P és az R ágra érvényes fotonelnyelődési összefüggéseket!

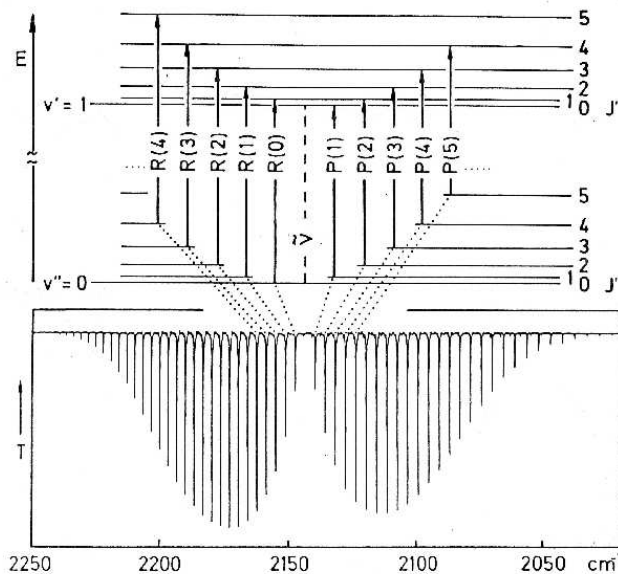


Figure 4.3-2 Assignment for the rotation-vibration lines of the CO fundamental vibration band.

- Határozd meg az alábbi spektrum alapján a HCl molekula rotációs állandóját, és a tehetetlenségi nyomatékát a 35 és 37-es Cl izotópokra egyaránt! ($h \approx 6.62 \times 10^{-34} \text{Js}$; $c \approx 3 \times 10^8 \text{m/s}$) (A spektrum majd a felmérőn!)