

Работа 50 Изучение чисто вращательных спектров поглощения двухатомных газов, расчёт момента инерции молекулы и равновесного межъядерного расстояния

Вопросы для подготовки конспекта теории

1. Определение понятия «спектр», виды спектров. Превращение энергии при поглощении кванта молекулой вещества. Уравнение волнового числа линии в спектрах поглощения (следствие закона сохранения энергии). Объяснение названия «чисто вращательный спектр поглощения».
2. Описание вращения двухатомной молекулы газа: модель жёсткого ротатора, формула квантования энергии, вращательный терм. Диаграмма вращательных квантовых уровней. Вращательная постоянная, её связь с моментом инерции молекулы.
3. Уравнение для волновых чисел линий чисто вращательного спектра поглощения в приближении жёсткого ротатора. Области спектра, в которых обычно расположены чисто вращательные спектры поглощения.
4. Описание колебаний атомов в двухатомной молекуле. Модель гармонического осциллятора: кривая потенциальной энергии, формула квантования энергии колебаний (диаграмма колебательных уровней), колебательная постоянная.
5. Модель ангармонического осциллятора: кривая потенциальной энергии, формула квантования энергии колебаний (диаграмма колебательных уровней), колебательная постоянная и коэффициент ангармоничности.
6. Зависимость вращательной постоянной от колебательного квантового числа. Вращательные постоянные для нулевого и первого колебательных уровней (B_0 и B_1) и равновесная вращательная постоянная B_e .
7. Принцип определения вращательной постоянной, момента инерции молекулы и межъядерного расстояния в ней по данным чисто вращательного спектра поглощения.
8. Причина различия относительных интенсивностей линий в чисто вращательном спектре поглощения. Расчёт заселённости вращательных квантовых уровней при данной температуре по уравнению распределения Больцмана.