Методические указания к практическим занятиям по разделу „Атомная физика."
Методические указания к решению задач домашнего задания по данной теме. (6 модуль)
Для студентов, изучающих физику 3 семестра.

Гипотеза де-Бройля.

Движущаяся частица с импульсом p, в некоторых ситуациях, может обладать волновыми свойствами с длиной волны

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m v},$$

где h – постоянная Планка $h = 6{,}63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с

(Длина волны де-Бройля)

1) Классическая частица, обладающая кинетической энергией – W, где

$W = \frac{p^2}{2m}$, откуда $p = \sqrt{2mW}$, имеет длину волны

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mW}},$$

Если заряженная частица приобретает кинетическую энергию в электрическом поле, пройдя разность потенциалов U, то

$$W = qU$$

где q – заряд частицы

и

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mqU}},$$

2) Релятивистская частица

Полная энергия такой частицы (1) $E = E_0 + W$, где

$E = mc^2$

$E_0 = m_0 c^2$ – энергия покоя

Длина волны де-Бройля:

$$\circledast \quad \lambda = \frac{h}{p}, \text{ где } \left\{ \begin{aligned} & p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \\ & E = mc^2 = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = \frac{E_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \end{aligned} \right\} \text{ исключив } v, \text{ получим:}$$

$$\Rightarrow p = \frac{\sqrt{E^2 - E_0^2}}{c}, \text{ тогда}$$

$$\circledast \quad \lambda = \frac{hc}{\sqrt{E^2 - E_0^2}}, \text{ учтя: } E - E_0 = W \text{ (из (1)), найдем}$$

$$\underline{E^2 - E_0^2} = W(W + 2E_0), \text{ и}$$

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{W(W+2E_0)}}, \text{ а также } \lambda = \frac{hc}{\sqrt{qU(qU+2E_0)}}$$

3) Если $W \ll E_0$ – частица классическая

$W \sim E_0$ – частица релятивистская

$$\underline{E_0 = m_0 c^2} = 9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 9 \cdot 10^{16} = 81{,}9 \cdot 10^{-15} \text{ Дж} =$$

энергия покоя электрона

$$= \frac{81{,}9 \cdot 10^{-15}}{1{,}6 \cdot 10^{-19}} \cong 0{,}51 \cdot 10^6 \text{ эВ} =$$

$$= \underline{0{,}51 \text{ МэВ}}.$$

Примеры решения задач.

Задача: Определить дебройлевскую длину волны электрона, кинетическая энергия которого равна 100эВ.

$W_e = 100эВ$
$W_e \ll E_0$
$\lambda_e = ?$

$$\lambda_e = \frac{h}{\sqrt{2m_eW_e}} = \frac{6{,}63\cdot10^{-34}}{\sqrt{2\cdot9{,}1\cdot10^{-31}\cdot10^2\cdot1{,}6\cdot10^{-19}}} = 1{,}22\cdot10^{-10}(м) = 1{,}22\ \text{Å}$$

Задача: На сколько отличаются дебройлевские длины волн протона и нейтрона, движущихся с энергией равной 1эВ?

$W = 1эВ$
$m_p = 1836{,}1m_e$
$m_n = 1839{,}6m_e$
$\Delta\lambda = ?$

$\Delta m = 3{,}5m_e$, т.е разность масс по отношению к массам самих частиц очень мала и Δ можно считать дифференциалом, а $m_p \approx m_n \approx m$,

тогда, продифференцировав

$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mW}}$ по массе, получим:

$$\underline{\Delta\lambda} = d\lambda = \frac{-h2Wdm}{22\cdot mW\sqrt{2mW}} = \underline{-\frac{h}{2\sqrt{2mW}}\cdot\frac{\Delta m}{m}} =$$

$$= \frac{6{,}63\cdot10^{-34}}{2\sqrt{2\cdot1838\cdot9{,}1\cdot10^{-31}\cdot1{,}6\cdot10^{-19}}}\cdot\frac{35me}{1838me} = 2{,}7\cdot10^{-14}(м) = 2{,}7\cdot10^{-4}\ \text{Å}$$

Задача: Какова скорость изменения дебройлевской длины волны протона, ускоряемого продольным электрическим полем напряжением 3 кВ/см, в тот момент, когда его кинетическая энергия равна 1кэВ?

$E = 3\cdot10^5 В/м$
$W = 10^3 эВ$
$\frac{d\lambda}{dt} = ?$

$q_{пр} = +e$

$$\lambda = \frac{h}{mv};\ где\ \left.\begin{aligned} v &= at \\ a &= \frac{qE}{m}\end{aligned}\right\}\ тогда\ \lambda = \frac{h}{qEt}$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = -\frac{h}{qEt^2}\ (*),$$

а $t = ?$ (когда $W = 10^3 эВ$)

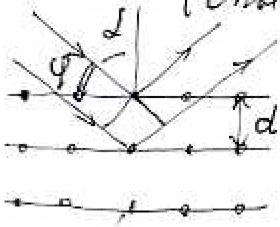
$$W = \frac{ma^2t^2}{2} \Rightarrow \underbrace{t^2}_{} = \frac{2W}{ma^2} = \frac{2Wm}{q^2E^2}$$

подставим в (*)

$$(*)\ \underline{\frac{d\lambda}{dt}} = -\frac{hqE}{2Wm} = \frac{6{,}63\cdot10^{-34}\cdot1{,}6\cdot10^{-19}\cdot3\cdot10^5}{\underbrace{2\cdot10^3\cdot1{,}6\cdot10^{-19}}_{W\ в\ Дж}\cdot1{,}67\cdot10^{-27}} = \underline{5{,}96\cdot10^{-5}\ м/с}$$

Дифракция электронов на кристаллических структурах.

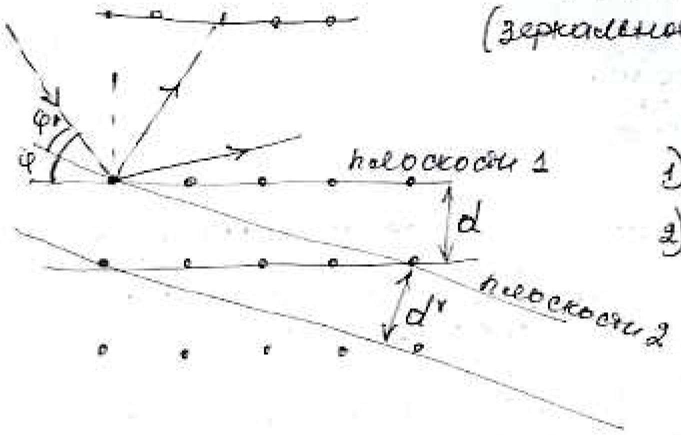
(Опыты Девиссона и Джермера)



Условие наблюд. max: $2d\sin\varphi = k\lambda$

(формула Вульфа-Брэггов)

(зеркальное отражение от как-бы возникших плоскостей)



1) $2d\sin\varphi = k_1\lambda$

2) $2d'\sin\varphi' = k_2\lambda$

Задача: Пучок электронов с кинетической энергией 10 кэВ проходит через тонкую поликристаллическую фольгу и образует систему дифракционных колец на экране, отстоящем от фольги на $\ell = 10$ см. Найти межплоскостное расстояние, для которого максимум отражения третьего порядка соответствует кольцу с радиусом $r = 1{,}6$ см.

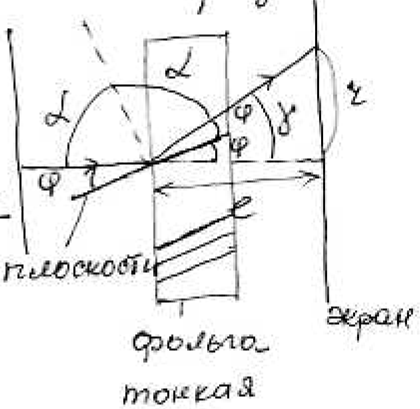
$W = 10\cdot10^3$ эВ

$\ell = 0{,}1$ м

$k = 3$

$r = 1{,}6\cdot10^{-3}$ м

$d = ?$



$\varphi = \frac{\gamma}{2}$ $\quad \gamma = ?$ $\quad \operatorname{tg}\gamma = \frac{r}{\ell} = \frac{1{,}6\cdot10^{-3}}{1\cdot10^{-1}} = 1{,}6\cdot10^{-2} = \gamma$

тогда $\varphi = 0{,}8\cdot10^{-2}$

Усл. В-Бр:

$2d\sin\varphi = k\lambda$

$2d\,\varphi = k\frac{h}{\sqrt{2mW}} \Rightarrow$

$$\Rightarrow d = \frac{kh}{2\varphi\sqrt{2mW}} = \frac{3\cdot6{,}63\cdot10^{-34}}{2\cdot8\cdot10^{-3}\sqrt{2\cdot9{,}1\cdot10^{-31}\cdot1{,}6\cdot10^{-15}}} =$$

$$= \frac{19{,}89\cdot10^{-34}}{16\cdot10^{-3}\cdot53{,}96\cdot10^{-23}} = 0{,}23\text{ нм}$$

Почему кольца? Вопрос вам!

Соотношение неопределенностей Гейзенберга.

1) $\Delta x \Delta p \geq h$

2) $\Delta E \Delta t \geq h$

т.к. неопределенности по сути есть малые величины, то математически, с ними следует обращаться как с дифференциалами.

Задача: Оценить относительную неопределённость импульса и кинетической энергии частицы, у которой неопределенность координаты в 20 раз больше её длины волны.

$\dfrac{\Delta x}{\lambda} = 20$

1) $\dfrac{\Delta p}{p} = ?$

2) $\dfrac{\Delta W}{W} = ?$

1) $\dfrac{\Delta p}{p} = ?$ учтя: $\Delta x \Delta p = h \Rightarrow \boxed{\Delta p = \dfrac{h}{\Delta x}}$

$\lambda = \dfrac{h}{p} \Rightarrow \boxed{p = \dfrac{h}{\lambda}}$, подставив в 1)

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{h \cdot \lambda}{\Delta x \cdot h} = \underbrace{\frac{\lambda}{\Delta x}}_{\text{из условия}} = \frac{1}{20} = 0{,}05 = 5\%$$

2) $\dfrac{\Delta W}{W} = ?$ учтя: $W = \dfrac{p^2}{2m} \Rightarrow$

$\Rightarrow \Delta W = \dfrac{2p\Delta p}{2m}$

$$\frac{\Delta W}{W} = \frac{2p\Delta p\, 2m}{2m\, p^2} = 2\,\frac{\Delta p}{p} = 2 \cdot 0{,}05 = 0{,}1 = 10\%.$$

Задача: Атом излучил фотон с длиной волны $\lambda = 550$ нм за время равное $\tau = 10^{-8}$с. Оценить неопределённость его координаты, энергии и относит. неопр. его длины волны.

для фотона

$\tau \equiv \Delta t = 10^{-8}$ с

$\lambda = 5{,}5 \cdot 10^{-7}$ м

$\Delta x = ?$

$\Delta E = ?$

$\dfrac{\Delta \lambda}{\lambda} = ?$

τ – неопределенность во времени излучения фотона (определяется временем жизни е в возбужденном состоянии)

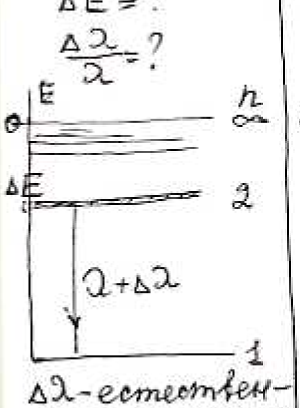
1) $\Delta x = c\Delta t = 3 \cdot 10^{8} \cdot 10^{-8} = 3$м

2) $\underset{\text{из соотн неопр.}}{\Delta E} = \dfrac{h}{\Delta t} = \dfrac{6{,}63 \cdot 10^{-34}}{10^{-8}} = 6{,}63 \cdot 10^{-26} = 4{,}1 \cdot 10^{-7}$ эВ

3) $E = \dfrac{hc}{\lambda} \Rightarrow \Delta E = \cancel{-}\dfrac{hc}{\lambda^2}\Delta\lambda \Rightarrow$

знак чисто физический

$$\Rightarrow \Delta\lambda = \underbrace{\frac{\Delta E}{h}}_{1/\Delta t} \cdot \frac{\lambda^2}{c} = \frac{\lambda^2}{c\Delta t} = \frac{\lambda^2}{\Delta x} = 1 \cdot 10^{-3}\ \text{Å}$$

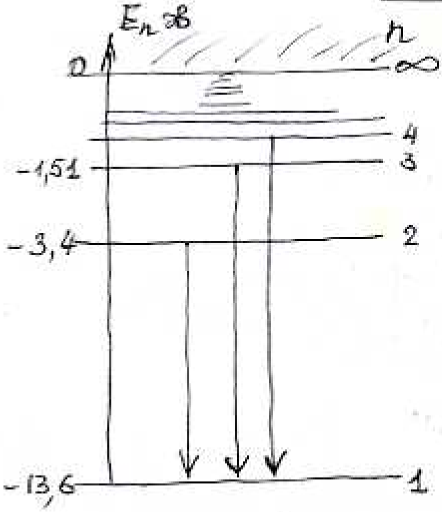


$\Delta\lambda$ - естественная ширина спектральной линии.

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\lambda}{\Delta x} = \frac{0{,}55 \cdot 10^{-6}}{3} = 1{,}8 \cdot 10^{-7}$$

! $\dfrac{\Delta\lambda}{\lambda}$ – степень немонохроматичности излучения

Спектральные закономерности
Теория Бора



Энергетическая схема атома водорода (распределение по возможным значениям энергии электронов в атоме)

Состояния атома бывает основным и возбужденным:
1) основное - все эл-ны в атоме находятся в основном состоянии, т.е. обладают min возможным для них значением энергии.
2) возбужденное - когда хотя бы один эл-н находится в состоянии с энергией большей, чем он может иметь в основном состоянии.

Постулаты Бора
1) О стационарных орбитах
$$L = pr = n\hbar$$
момент импульса
2) излучение только при переходе с одной орбиты на другую.

Упорядочение излучения: введение серий излучения (переходы е из всех выше лежащих состояний энергии в одно)

Формула Бальмера (описывающая сериальное излучение)
$$\tilde{\nu} = RZ^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$ где
$\tilde{\nu}$ - волновое число $= \frac{1}{\lambda}$, где
λ - длина волны излучения.
R - постоянная Ридберга $= 1{,}0967 \cdot 10^7 \frac{1}{м}$
n - главное квантовое число
n_1 - значение главного квантового числа для уровня энергии, на который идет переход.
n_2 - с которого.

Энергия стационарного состояния $E_n = \frac{-hcR}{n^2} Z^2$
Z - зарядовое число ядра

Энергия излучения $h\nu = E_2 - E_1$
$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hcRZ^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

Комбинационный принцип Ритца.

Для описания системы энергетических состояний электрона в атоме Ритцем было введено понятие **термов**. $T=\frac{RZ^2}{n^2}$

Систему энергетических состояний атома называют иначе системой термов.
а излучение длиной волны λ по Ритцу определяется:

$$\tilde{\nu}=\frac{1}{\lambda}=T_1-T_2=RZ^2\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

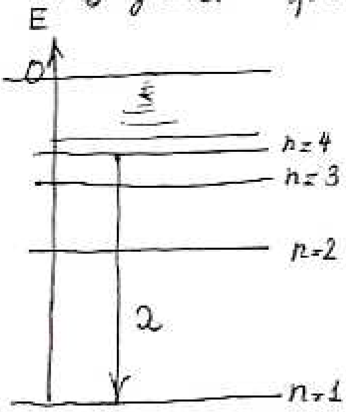
Связь энергии уровня с термом:

$$E=-hc\frac{RZ^2}{n^2}=-hcT$$

Задача. Определить квантовое число n возбужденного состояния атома водорода, если известно, что при переходе в основное состояние атом излучил фотон с длиной волны $\lambda=97{,}25$ нм

$\lambda=97{,}25$ нм

$n=?$



$$\frac{1}{\lambda}=R\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{n}\right)\Rightarrow n^2=\frac{1^2R\lambda}{R\lambda-1^2}$$

$$n^2=\frac{1{,}0967\cdot10^7\cdot97{,}25\cdot10^{-9}}{1{,}0663-1}=\frac{1{,}0663}{0{,}0663}=16$$

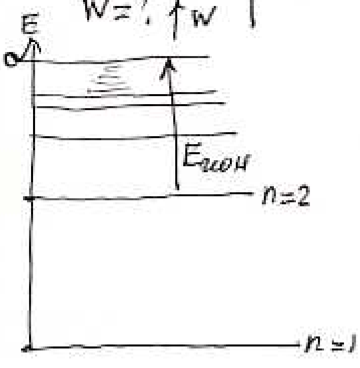
$n=4$

Задача: Вычислить кинетическую энергию электрона, выбитого из первого возбужденного состояния атома водор. фотоном, длина волны которого 0,2 мкм.

$n=2$

$\lambda=0{,}2$ мкм

$W=?$



$h\nu_\phi=E_{ион}+W$

Эл-н поглощает энергию, часть расходует на $E_{ион}$ (покидает атом), оставшаяся часть энергии – это его кинет. энергия.

$$E_{ион}=\Delta E=hcR\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{\infty}\right)$$

$$E_{ион}=\frac{6{,}63\cdot10^{-34}\cdot3\cdot10^8\cdot1{,}0967\cdot10^7}{4\cdot1{,}6\cdot10^{-19}}\doteq3{,}4\text{ эВ}$$

$$E_\phi=h\nu_\phi=\frac{hc}{\lambda}=\frac{6{,}63\cdot10^{-34}\cdot3\cdot10^8}{2\cdot10^{-7}\cdot1{,}6\cdot10^{-19}}=6{,}2\text{ эВ, тогда:}$$

$$W=h\nu_\phi-E_{ион}=6{,}2-3{,}4=2{,}8\text{ эВ}$$

Задача: 1) Показать, что для атома водорода на боровских стационарных орбитах укладывается целое число длин волн де-Бройля.

2) Определить длину волны на первой боровской орбите.

3) Чему равна λ_e на второй боровской орбите, выраженная через радиус второй орбиты (R).

1) Исходя из условия квантования (первого постулата Бора):

$$pr = n\hbar \Rightarrow pr = n\frac{h}{2\pi} \Rightarrow 2\pi r = n\frac{h}{p} \Rightarrow \underline{2\pi r = n\lambda}$$

2) $\lambda_1 = \frac{2\pi r_{Б1}}{n}$ (*) где $r_{Б_1} = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2} = 0{,}53\,\text{Å}$

$\boxed{r_Б \sim n^2}$

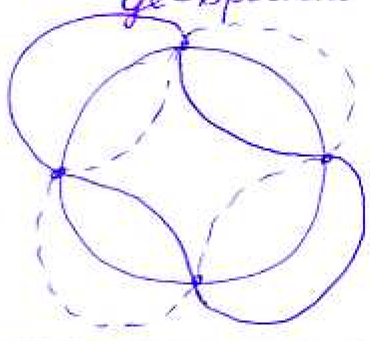
и тогда

(*) $\underline{\lambda_1 = 3{,}32\,\text{Å}}$

3) $pR = n\hbar \Rightarrow 2\pi R = n\lambda_2$ если, по условию $n=2$,

то $\underline{\lambda_2 = \pi R}$

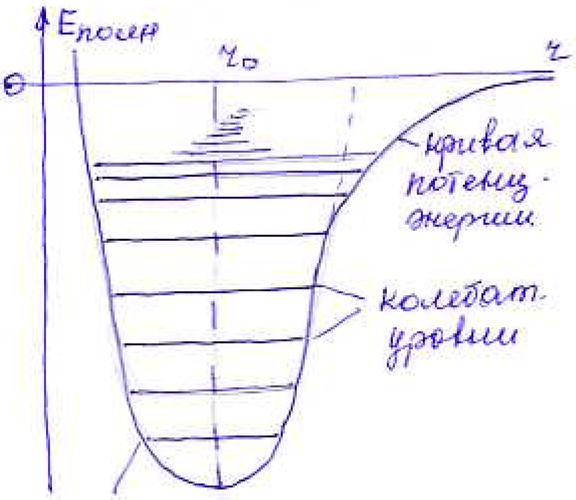
Графически: при $n=2$ укладывается на орбите две длины волны де-Бройля (стоячие волны)



стоячие волны с числом узлов $2n$ ($n=2$; число узлов - 4)

О применении решений ур-ий Шредингера для описания состояния электрона в потенциальной яме (ящике), читайте в учебнике Э.В. Шпольского „Атомная физика" том I, §§ 156-157.

О молекулах (двухатомных)



Минимальная колеб. энергия молекулы (при $v=0$)

$$E_{min} = \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

(рис. 1)

На рисунке энергетическая схема, описывающая распределение энергии (полной) молекулы в основном состоянии.

Кривая потенциальной энергии определяется состоянием электронной конфигурации молекулы. ($E_{эл.конф.}$)

r_0 - равновесное расстояние между ядрами молекулы.

Колебательные уровни - значения колебательной энергии молекулы. ($E_{кол.}$)

Так как молекулы колеблются и вращаются одновременно, то, естественно, существуют так называемые вращательные уровни энергии, которые на такой схеме располагаются между колебательными уровнями энергии. ($E_{вращ.}$)

Полная энергия молекулы описывается выражением:

$$E_{полн} = E_{эл.конф} + E_{кол} + E_{вращ}. \qquad (E_{эл.конф} > E_{кол} > E_{вращ})$$

где: $E_{кол} = \hbar\omega_0\left(v+\frac{1}{2}\right)\cdot\left[1-x\left(v+\frac{1}{2}\right)\right]$ - в общем случае. (*)

v - колебательное квантовое число - $v=0,1,2,\dots$

x - коэффициент ангармоничности (о нем позднее)

$$E_{вращ} = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) \qquad (xx)$$

I - момент инерции молекулы

J - вращательное квантовое число - $J=0,1,2,\dots$

$I=\mu d^2$, где μ - приведенная масса $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$

d - расстояние между атомами в двухатомной молекуле.

При изменении энергетического состояния, молекулы излучают (и поглощают) так называемые полосатые спектры молекул.

По типу эти спектры делятся на:

1) Электронно-колебательные
2) Колебательно-вращательные
3) Вращательные

1) Возникают при изменении электронной конфигурации молекулы. Поскольку задач на эту тему Вам не предлагается, рассматривать их мы не будем.

2) В области, где кривая потенциальной энергии (рис.1) представляет собой параболу (т.е. при малых значениях колебательного квантового числа – v) молекула ведет себя как гармонический осциллятор, и, уровни колебательной энергии располагаются на одинаковом энергетическом расстоянии.
Значения энергии этих уровней описывается выражением

$$E_{кол} = \hbar\omega_0\left(v+\frac{1}{2}\right), \quad (v)$$ а разность между

этими состояниями есть величина постоянная и равна, естественно; (энергия излучения или погл.)

$$\Delta E_{кол} = \hbar\omega_0$$, где ω_0 – собственная частота колебаний и является характеристикой молекулы.

Там, где кривая потенциальной энергии перестает совпадать с параболой, колебательные уровни сгущаются и выражение (v) преобразуется в выражение (*).
Выражение (*) позволяет рассчитать распределение энергетических состояний молекулы при больших значениях колебательного квантового числа.

3) Вращательные уровни располагаются между колебательными, при этом интервал между значениями энергии растет с увеличением вращательного квантового числа на одну и ту же величину, называемую энергетическим смещением вращательных уровней и равным:

$\Delta E_{вращ.} = \dfrac{\hbar^2}{I}$ — эта величина постоянна для каждой молекулы, зависит от её момента инерции и не зависит от квантового числа J.

Схема распределения вращательных уровней энергии

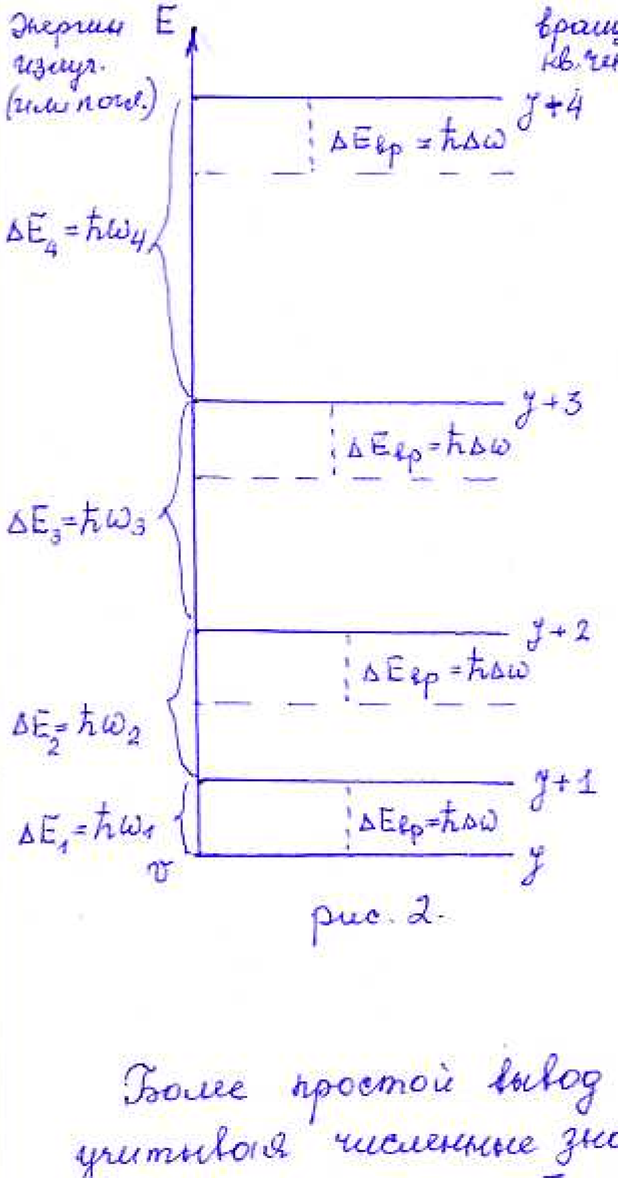


рис. 2.

В общем случае вывод выражения для $\Delta E_{вращ}$:

по схеме рис. 2 энергии вращательных уровней:

$$\left.\begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \\ E_2 &= \frac{\hbar^2}{2I}(J+1)(J+2) \\ E_3 &= \frac{\hbar^2}{2I}(J+2)(J+3) \end{aligned}\right\} \text{тогда}$$

$$\left.\begin{aligned} \Delta E_1 &= \frac{\hbar^2}{2I}(J+1)(J+2-J) = \frac{\hbar^2}{I}(J+1) \\ \Delta E_2 &= \frac{\hbar^2}{2I}(J+2)(J+3-J-1) = \frac{\hbar^2}{I}(J+2) \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \underline{\Delta E_{вр}} = \underline{\Delta E_2 - \Delta E_1} = \frac{\hbar^2}{I}(J+2-J-1) = \underline{\frac{\hbar^2}{I}}$$

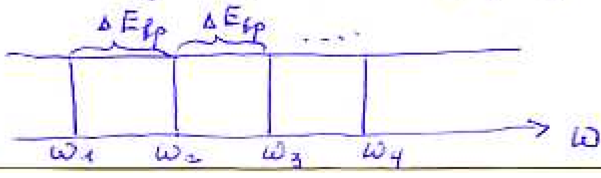
Если учесть, что энергия излучения $\Delta E = \hbar\omega$, то

$$\Delta E_{вр} = \hbar\omega_2 - h\omega_1 = \hbar(\omega_2 - \omega_1) = \underbrace{\hbar\Delta\omega = \frac{\hbar^2}{I}},\ \text{и}$$

$$\underbrace{\Delta\omega = \frac{\hbar}{I}}.$$

Более простой вывод этого выражения можно сделать учитывая численные значения вращательного квантового числа.

$$\left.\begin{aligned} &\text{Если } J = 0,\ \text{то } E_{1\,вращ} = 0 \\ &\text{—"— } J = 1,\ \text{то } E_{2\,вращ} = \frac{\hbar^2}{I} \end{aligned}\right\} \Delta E_1 = \frac{\hbar^2}{I} \text{ и равна } = \hbar\omega_1$$



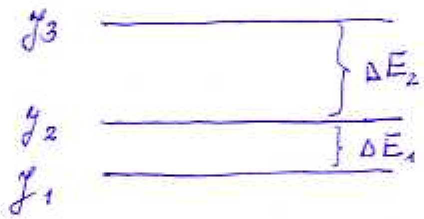
Примеры решения задач по молекулам.

Задача. Для двухатомной молекулы известны интервалы между тремя последовательными вращательными уровнями энергии $\Delta E_1 = 0{,}2$ мэВ и $\Delta E_2 = 0{,}3$ мэВ. Найти вращательную энергию среднего уровня.

$\Delta E_1 = 0{,}2$ мэВ
$\Delta E_2 = 0{,}3$ мэВ

$E(J_2) = ?$

Пусть:



Обозначим:

$J_3 = J+1$

$J_2 \equiv J$

$J_1 = J-1$

тогда надо найти энергию уровня с кв. числом J

При наших обозначениях энергии вращательных уровней определятся:

$$\left.\begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2}{2I}(J-1)J \\ E_2 &= \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) \\ E_3 &= \frac{\hbar^2}{2I}(J+1)(J+2) \end{aligned}\right\}\text{отсюда}$$

$$\Delta E_1 = E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1-J+1) = \frac{\hbar^2}{I}J \quad (1)$$

$$\Delta E_2 = E_3 - E_2 = \frac{\hbar^2}{2I}(J+1)(J+2-J) = \frac{\hbar^2}{I}(J+1) \quad (2)$$

Для того, чтобы найти E_2 надо знать J; $J+1$; $\frac{\hbar^2}{I}$

Из равенства (1) найдем $J = \frac{\Delta E_1 I}{\hbar^2}$

Из равенства (2) найдем $J+1 = \frac{\Delta E_2 I}{\hbar^2}$

$\frac{\hbar^2}{I}$ – смещение вращательных уровней $\Delta E_{вр} = \Delta E_2 - \Delta E_1 = \frac{\hbar^2}{I}$ (смотрите теорию впереди),

тогда $E_2 \equiv E(J_2) = \frac{\hbar^2}{2I} \cdot \frac{\Delta E_1 I}{\hbar^2} \cdot \frac{\Delta E_2 I}{\hbar^2} = \frac{\Delta E_1 \cdot \Delta E_2}{2} \cdot \frac{I}{\hbar^2} = \frac{\Delta E_1 \cdot \Delta E_2}{2(\Delta E_2 - \Delta E_1)} =$

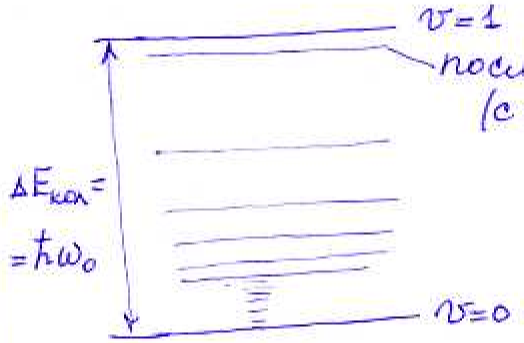
$= \ldots\ldots$

Задача. Сколько линий содержит чисто вращательный спектр молекулы OH между колебательными уровнями с колебательными квантовыми числами $v=0$ и $v=1$?

OH
$v=0$; $v=1$

$J=?$

Число спектральных линий равно числу вращательных уровней, заключенных между колебательными уровнями.



последний вращательный уровень (с квант. числом J).

Табличные данные:
$d = 97{,}1$ пм
$\omega_0 = 7{,}036\cdot10^{14}\ c^{-1}$ – собственная частота колеб.
$m(O) = 15{,}9994$ а.е.м
$m(H) = 1{,}0079$ а.е.м.

Так как энергии вращательного спектра на порядок меньше энергии колебательного перехода, то можно предположить, что последний вращательный уровень по энергии близок к энергии верхнего (с $v=1$) колебательного уровня.

Тогда $\Delta E_{кол} = E_{J\,вращ.}$

(При заданных условиях коэфф. ангармон. можно пренебречь)

$$\hbar\omega_0 = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow J(J+1) = \frac{2I\omega_0}{\hbar} \quad (*)$$

учтя

$$I = \mu d^2 = \frac{m_0 m_H}{m_0 + m_H}d^2 = 1{,}48\cdot10^{-47}\ кг\cdot м^2$$

$$(*)\ J(J+1) \le \frac{2\cdot1{,}48\cdot10^{-47}\cdot7{,}036\cdot10^{14}}{1{,}0546\cdot10^{-34}} = 197{,}5, \text{ тогда}$$

$J = 13$ $\quad (13\times14 = 182)$

Итого: между двумя колебательными уровнями в молекуле OH в области, где кривая потенц. энергии подобна параболе, находится 13 вращат. уровней

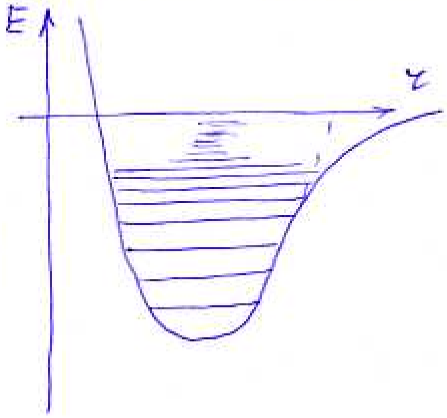
P.S. Константы двухатомных молекул (собственная частота колебаний и межъядерные расстояния) написаны на стенде кафедры физики рядом с домашними заданиями.

Задача. Определить число колебательных энергетических уровней, которое имеет молекула HBr, если коэффициент ангармоничности $\varkappa = 17{,}1\cdot10^{-3}$.

HBr

$\varkappa = 17{,}1\cdot10^{-3}$

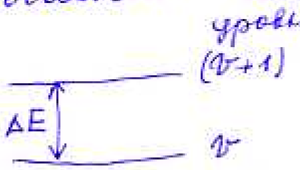
$v_{max} = ?$



При увеличении значений квантовых чисел соответствующих колебательным состояниям энергетические уровни сгущаются, а интервал между ними уменьшается.

Квантовое число соответствующее последнему колебательному уровню, после которого молекула диссоциирует, обозначим v_{max}. В этом случае можно считать, что энергетическое расстояние между последними соседними уровнями практически равно 0.

Энергетическое расстояние между соседними уровнями в области ангармоничности обозначим ΔE.



$$\underline{\Delta E} = E_{v+1} - E_v = \hbar\omega_0\left[v+\frac{3}{2} - \varkappa\left(v+\frac{3}{2}\right)^2 - v - \frac{1}{2} + \varkappa\left(v+\frac{1}{2}\right)^2\right] =$$

$$= \hbar\omega_0\left[1+\varkappa\left(v+\frac{1}{2}\right)^2 - \left(v+\frac{3}{2}\right)^2\right] =$$

$$= \hbar\omega_0\left[1+\varkappa\left(v+\frac{1}{2} - v - \frac{3}{2}\right)\cdot\left(v+\frac{1}{2}+v+\frac{3}{2}\right)\right] = \underline{\hbar\omega_0\left(1-2\varkappa(v+1)\right)}$$

если $v = v_{max}$, то

$$\hbar\omega_0\left[1-2\varkappa\left(v_{max}+1\right)\right] = 0 \quad \text{т.е.}$$

$$2\varkappa\left(v_{max}+1\right) = 1 \quad \text{и отсюда:}$$

$$v_{max} = \frac{1}{2\varkappa} - 1 = \left(2\cdot17{,}1\cdot10^{-3}\right)^{-1} - 1 = 28{,}2, \quad \text{т.е.}$$

$$\underline{v_{max} = 28};$$