

Chemia kwantowa B – zadania domowe

Zestaw 11.

Zadanie 1. Wyznaczyć rząd wiązania w drobinach O_2^+ , O_2 , O_2^- i O_2^{2-} . Wyznaczyć termy molekularne odpowiadające konfiguracjom podstawowym tych drobin. Które z tych drobin są diamagnetykami, a które paramagnetykami? W której drobinie wiązanie między atomami tlenu jest najkrótsze?

Zadanie 2. W przybliżeniu energię molekuly dwuatomowej można przestawić jako sumę energii elektronowej, oscylacyjnej i rotacyjnej:

$$E_{k v J} = E_k^{\text{el}} + E_v^{\text{osc}} + E_J^{\text{rot}}, \quad (2.1)$$

przy czym cząsteczka traktowana jest jednocześnie jako oscylator harmoniczny i rotator sztywny o masie równej masie zredukowanej atomów tworzących cząsteczkę i długości równej długości wiązania cząsteczki. Pod wpływem promieniowania elektromagnetycznego cząsteczka może przejść ze stanu podstawowego opisanego zespołem liczb kwantowych $(k_i; v_i; J_i)$ do stanu $(k_f; v_f; J_f)$. Zgodnie z regułami wyboru dla takich przejść

$$\Delta J = J_f - J_i = \pm 1. \quad (2.2)$$

Oznaczmy energię przejścia $(k_i; v_i; J_i) \rightarrow (k_i; v_f; J_i + 1)$ jako E_+ , zaś energię przejścia $(k_i; v_i; J_i) \rightarrow (k_i; v_f; J_i - 1)$ jako E_- . Na podstawie widma cząsteczki zmierzono rozszczepienie obu linii,

$$\Delta E = E_+ - E_-. \quad (2.3)$$

Wyznaczyć długość wiązania cząsteczki.