

Chemia kwantowa B – zadania domowe

Zestaw 6.

Zadanie 1. Zgodnie z rozkładem Maxwella-Boltzmana w stanie równowagi liczba cząstek w n -tym stanie kwantowym, N_n , jest proporcjonalna do $g_n e^{-\frac{E_n}{kT}}$, gdzie g_n jest degeneracją energii E_n . Załóżmy, że dwuatomowa molekula jest sztywnym rotatorem o masie równej jej masie zredukowanej μ . Jeśli masy atomów wchodzących w skład molekuly wynoszą m_1 i m_2 , wówczas

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}. \quad (1.1)$$

Dla stanów rotacyjnych zachodzi

$$g_J = 2J + 1 \quad (1.2)$$

i

$$E_J = BJ(J + 1). \quad (1.3)$$

Wyznaczyć najliczniej obsadzony stan rotacyjny w stanie równowagi w danej temperaturze T — znaleźć wyrażenie ogólne na J_{\max} oraz obliczyć J_{\max} dla cząsteczki chlorowodoru (H^{35}Cl) przyjmując długość wiązania $R = 1,27455 \text{ \AA}$, w temperaturze $20 \text{ }^\circ\text{C}$.

Wskazówka: Wyznaczyć maksimum dyskretnej funkcji $f(J) = \frac{N_J}{N_0}$.

Zadanie 2. W astronomii bardzo duże znaczenie przy klasyfikacji widmowej gwiazd ma widmo emisyjne wodoru, w szczególności *seria Balmera*. Jest to zbiór linii powstałych w wyniku przejść elektronu ze stanów $|nlm\rangle$ o $n \geq 3$ do stanu $|2lm\rangle$. Kolejno dla $n = 3, 4, 5, \dots$ linie te oznaczają się jako $\text{H}_\alpha, \text{H}_\beta, \text{H}_\gamma, \dots$. Wyznaczyć długości fal odpowiadających trzem pierwszym liniom serii Balmera. W jakim zakresie promieniowania elektromagnetycznego leżą te linie?

Zadanie 3. Wyznaczyć promień Bohra dla atomu wodoru utworzonego z hipotetycznych cząstek o masach równych masom elektronu i protonu, ale oddziałujących wyłącznie grawitacyjnie.