

**МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
КАФЕДРА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ
КУРС "ОСНОВЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
СПЕКТРОСКОПИИ" 2009/2010 учебный год.**

Типовые вопросы и задачи.

1. Перенос излучения.

Вывести уравнение переноса излучения для нерассеивающей среды. Решая это уравнение получить закон Ламберта-Бугера. Пояснить понятия оптической и массовой длины пути и оптической плотности.

Получить соотношение между коэффициентами Эйнштейна а также между коэффициентами Эйнштейна и массовыми коэффициентами излучения и поглощения для случая изотропного излучения.

Понятие интегрального показателя поглощения его связь с коэффициентами Эйнштейна. Примеры.

Понятие силы осциллятора. Связь силы осциллятора с интегральным показателем поглощения и коэффициентами Эйнштейна. Примеры.

Статистическая модель полосы. Усредненная поглощательная способность.

Квантовомеханическое определение коэффициентов Эйнштейна. Понятие матричного элемента дипольного момента оптического перехода. Интенсивность оптических переходов.

Излучение ансамблей линий. Понятие моделей колебательно-вращательных полос.

Определить поток лучистой энергии а.ч.т. проходящей через единичную площадку в одном направлении.

Интенсивность излучения термодинамически-неравновесного газа.

2. Уширение спектральных линий.

Совместный учет столкновительного и доплеровского уширения спектральных линий. Форма контур, полуширина.

Доплеровское уширение спектральных линий. Форма контура, полуширина. Оценки доплеровской полуширины для радиационных переходов в атомах и молекулах.

Нормальное уширение спектральных линий. Форма контура полуширина. Оценки полуширины для радиационных переходов в атомах и молекулах.

Понятие эквивалентной ширины спектральной линии. Эквивалентная ширина спектральной линии уширенной за счет эффекта Доплера.

Понятие эквивалентной ширины спектральной линии. Эквивалентная ширина спектральной линии уширенной за счет эффекта Допплера и столкновений.

Столкновительное уширение спектральных линий. Форма контура полуширина. Оптический диаметр частицы. Оценки столкновительной полуширины для радиационных переходов в атомах и молекулах.

Штарковский механизм уширения спектральных линий в плазме. Форма контура, полуширина.

Понятие эквивалентной ширины спектральной линии. Эквивалентная ширина спектральной линии уширенной за счет столкновений.

3. Спектры атомов.

Спектры многоэлектронных атомов. Приближение самосогласованного поля. Диаграммы Гротриана.

Расщепление атомных уровней за счет релятивистского эффекта.

Расщепление атомных уровней за счет спин-орбитального взаимодействия.

4. Спектры молекул.

Свойства симметрии молекул. Точечные группы симметрии двухатомных гомоядерных и гетероядерных молекул.

Перечислить элементы симметрии и указать точечную группу симметрии молекул: CO, N₂, CO₂, H₂O, CH₄, SF₆.

Спектральное распределение линий в Р-ветви отдельного колебательного перехода при учете взаимодействия колебаний и вращения. Распределение интенсивности вращательных линий.

Колебательная интенсивность в электронном спектре. Факторы Франка-Кондона.

Интенсивности вращательных линий отдельного колебательного перехода в модели гармонического осциллятора - жесткого ротатора. Влияние взаимодействия колебаний и вращения.

Структура спектра колебательно-вращательных полос двухатомных и многоатомных молекул при высоких температурах газа.

Интенсивность вращательных линий в электронно-колебательно- вращательном спектре. Правила отбора.

Колебательная интенсивность в электронном спектре. Факторы Франка-Кондона.

Вероятность радиационных колебательных переходов в многоатомной молекуле. Нормальные координаты. Правила отбора.

Спектральное распределение линий в R-ветви отдельного колебательного перехода при учете взаимодействия колебаний и вращения. Распределение интенсивности вращательных линий.

Резонанс Ферми и его влияние на интенсивность линий в колебательно-вращательном спектре.

Структура электронно-колебательно-вращательного спектра. Правила отбора.

P, R, Q-ветви. Интенсивности вращательных линий.

Спектральное распределение линий в Q-ветви отдельного колебательного перехода при учете взаимодействия колебаний и вращения. Распределение интенсивности вращательных линий.

Тип связи "в" по Гунду. Особенности расположения вращательных уровней.

Тип связи "а" по Гунду. Особенности расположения вращательных уровней.

5. Задачи.

Определить интегральную интенсивность излучения линии со столкновительным контуром и полушириной $\gamma_c = 0.01 \text{ см}^{-1}$ при $T = 2000 \text{ К}$. Волновое число линии $w = 10000 \text{ см}^{-1}$, парциальное давление излучающего газа $P = 0.01 \text{ атм.}$, длина газового объема $l = 100 \text{ см}$, интегральный показатель поглощения линии $S = 1.0 \text{ атм}^{-1} \times \text{см}^{-2}$.

Определить отношение интенсивностей линий P 18 и Q10 отдельного колебательного перехода. Различием Планковских функций для этих линий пренебречь. Вращательная постоянная $B_e = 1.0 \text{ см}^{-1}$, температура газа $T = 1000 \text{ К}$.

Определить интегральную интенсивность излучения в линии с доплеровским контуром и полушириной $\gamma_D = 0.01 \text{ см}^{-1}$ при $T = 3000 \text{ К}$. Волновое число линии $w = 10000 \text{ см}^{-1}$, давление газа $P = 0.01 \text{ атм.}$, парциальное содержание излучающей компоненты $\xi = 0.01$, длина излучающего объема $l = 10 \text{ см}$. Интегральный показатель поглощения линии $S = 1.0 \text{ атм}^{-1} \times \text{см}^{-2}$

Излучающий газ R находится в смеси газов A B и C. Парциальные оптические сечения газов сортов A, B и C в уширении спектральных линий R составляют соответственно $\sigma_A = 1.5 \times 10^{-15} \text{ см}^2$, $\sigma_B = 2.5 \times 10^{-15} \text{ см}^2$, и $\sigma_C = 3 \times 10^{-15} \text{ см}^2$, молекулярные веса R, A, B и C - 14, 28, 14 и 44. Мольные концентрации A B и C равны: $\xi_A = 0.1$, $\xi_B = 0.5$, $\xi_C = 0.3$. Определить уширение спектральных линий излучающих молекул сорта R при температуре $T = 3000 \text{ К}$ и полном давлении смеси $P = 1.0 \text{ атм}$.

Отношение Доплеровской и столкновительной полуширин при $T = 5000$ К равно 1. Каким оно будет при $T = 1000$ К? $P = \text{const}$

Излучающий газ R находится в смеси газов A, B и C. Парциальные оптические сечения газов сортов A, B и C в уширении спектральных линий R составляют соответственно $\sigma_A = 2 \times 10^{-15} \text{ см}^2$, $\sigma_B = 4.5 \times 10^{-15} \text{ см}^2$, и $\sigma_C = 9 \times 10^{-15} \text{ см}^2$, молекулярные веса газов сортов R, A, B и C – 15, 20, 14, и 18. Мольные концентрации A, B и C равны: $\xi_A = 0.2$, $\xi_B = 0.4$, $\xi_C = 0.2$. Определить уширение спектральных линий излучающих молекул сорта R при температуре $T = 1000$ К и полном давлении смеси $P = 0.1$ атм.

Определить отношение интенсивностей линий P 18 и Q 10 отдельного колебательного перехода. Различием Планковских функций для этих линий пренебречь. Вращательная постоянная $B_e = 1.0$ см⁻¹, температура $T = 1000$ К.

В полосе отдельного колебательного перехода кант расположен в R; ветви на расстоянии 60 см^{-1} от центра полосы. Определить спектроскопическую постоянную взаимодействия колебаний и вращения если вращательная постоянная $B_e = 1.0 \text{ см}^{-1}$.

Определить интегральную интенсивность излучения линии с доплеровской полушириной $\gamma_D = 0.01 \text{ см}^{-1}$, столкновительной полушириной $\gamma_c = 0.3 \text{ см}^{-1}$ и нормальной полушириной $\gamma_n = 0.01 \text{ см}^{-1}$ при температуре $T = 3000$ К. Волновое число в центре линии $w = 10000 \text{ см}^{-1}$ парциальное содержание излучающей компоненты $\xi = 0.05$, интегральный показатель поглощения линии $S = 0.1 \text{ атм}^{-1} \times \text{см}^{-2}$, длина газового объема $l = 10$ см давление газа $P = 0.1$ атм.

Отношение Доплеровской и столкновительной полуширин при $T = 1000$ К равно 10. Каким оно будет при 100 К? $P = \text{const}$.

Оценить давление при котором доплеровская ширина линии с волновым числом $w = 2000 \text{ см}^{-1}$ будет равна столкновительной. Оптическое сечение молекул $\sigma = 4 \times 10^{-15} \text{ см}^2$, молекулярный вес 28, температура газа $T = 3000$ К.

В выбранном спектральном диапазоне расположено определенное количество одинаковых сильно реабсорбированных спектральных линий уширенных за счет столкновений. Как изменится излучение газа если в этом же спектральном диапазоне будет расположено вдвое меньшее количество спектральных линий удвоенной интенсивности? Известно что эквивалентная ширина линий много меньше среднего расстояния между ними.

Определить тонкую структуру второй линии в серии Бальмера атома водорода.

Интегральный коэффициент Эйнштейна спонтанного испускания составляет $A=10^6$ s^{-1} , частота перехода $\nu = 10^{15} s^{-1}$, кратности вырождения верхнего и нижнего уровней соответственно 3 и 1. Определить величину матричного элемента перехода.

Определить отношение интенсивностей линий P 20 и R 20 одного колебательного перехода. Различием Планковских функций для этих линий пренебречь.

Вращательная постоянная $B_e = 0.4 \text{ см}^{-1}$, температура $T = 2000 \text{ К}$.

В полосе отдельного колебательного перехода кант расположен в R -ветви на расстоянии 40 см^{-1} от центра полосы. Определить спектроскопическую постоянную взаимодействия колебаний и вращения, если вращательная постоянная равна $B_e = 2.0 \text{ см}^{-1}$.

Определить отношение интенсивностей линий P 20 и R 10 одного колебательного перехода. Различием Планковских функций для этих линий пренебречь.

Вращательная постоянная $B_e = 1.0 \text{ см}^{-1}$, температура $T = 1000 \text{ К}$.

Определить интегральную интенсивность излучения в линии с доплеровским контуром и полушириной $\gamma_D = 0.1 \text{ см}^{-1}$ при $T = 2000 \text{ К}$. Волновое число линии $\omega = 1000 \text{ см}^{-1}$, давление газа $P = 0.1 \text{ атм}$. парциальное содержание излучающей компоненты $\xi = 0.1$, длина излучающего объема $l = 10 \text{ см}$. Интегральный показатель поглощения линии $S = 0.1 \text{ атм}^{-1} \times \text{см}^{-2}$.

Определить интегральную интенсивность излучения линии с доплеровской полушириной $\gamma_D = 0.01 \text{ см}^{-1}$, столкновительной полушириной $\gamma_c = 0.1 \text{ см}^{-1}$ и нормальной полушириной $\gamma_n = 0.3 \text{ см}^{-1}$ при температуре $T = 2000 \text{ К}$. Волновое число линии в центре линии $\omega = 3000 \text{ см}^{-1}$ парциальное содержание излучающей компоненты $\xi = 0.25$, интегральный показатель поглощения линии $S = 1.0 \text{ атм}^{-1} \times \text{см}^{-2}$, длина газового объема $l = 200 \text{ см}$, давление газа $P = 0.1 \text{ атм}$.

В выбранном спектральном диапазоне расположено определенное количество одинаковых сильно реабсорбированных спектральных линий уширенных за счет столкновений. Как изменится излучение газа если в этом же спектральном диапазоне будет расположено втрое меньшее количество спектральных линий учетверенной интенсивности? Известно, что эквивалентная ширина линий много меньше среднего расстояния между ними.