

# ΠΕΡΙΣΤΡΟΦΙΚΗ ΚΙΝΗΣΗ ΤΩΝ ΜΟΡΙΩΝ

## Η ΑΠΟΨΗ ΤΗΣ ΚΛΑΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

### Μια μικρή εισαγωγή

**Η ολική ενέργεια ενός μορίου είναι το άθροισμα :**

1. Της ενέργειας εξ αιτίας ηλεκτρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων  $E_{\eta/\mu}$  μεταξύ των ηλεκτρονίων-ηλεκτρονίων των πρωτονίων-πρωτονίων και των ηλεκτρονίων-πρωτονίων ενός μορίου.
2. Της κινητικής ενέργειας εξ αιτίας μεταφορικής κίνησης  $K_{\text{μετ}}$  του κέντρου μάζας του μορίου.
3. Της κινητικής ενέργειας εξ αιτίας της περιστροφικής κίνησης  $K_{\text{περ}}$  γύρω από το κέντρο μάζας του μορίου.
4. Της ενέργειας εξ αιτίας της ταλάντωσης των ατόμων ως προς το κέντρο μάζας του μορίου  $E_{\text{ταλ}}$ .

$$E_{\text{ολ}} = E_{\eta/\mu} + K_{\text{μετ}} + K_{\text{περ}} + E_{\text{ταλ}}$$

Είναι γνωστό ότι η  $K_{\text{μετ}} = 3/2 k T$  για κάθε μόριο και είναι **ανεξάρτητη από την εσωτερική δομή του**. Για την  $E_{\eta/\mu}$  και την  $E_{\text{ταλ}}$  θα τις αναπτύξω σε επόμενη ανάρτηση.

**Ας δούμε όμως την κινητική ενέργεια εξ αιτίας της περιστροφικής κίνησης  $K_{\text{περ}}$  γύρω από το κέντρο μάζας του μορίου.**

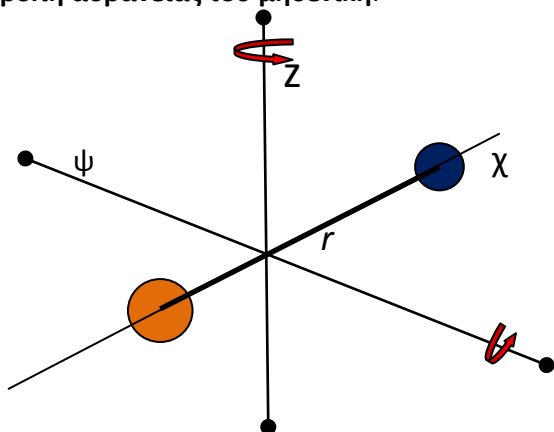
Ένα διατομικό μόριο AB (π.χ. CO) αποτελείται από άτομα με μάζες  $m_1$  και  $m_2$  σταθερά συνδεδεμένα και περιστρέφεται γύρω από άξονα που περνά από το κέντρο μάζας του και είναι κάθετος στον άξονα του μορίου (τον άξονα που συνδέει τα δυο άτομα).

**Ερώτημα 1.** Ποιες είναι οι δυνατότητες περιστροφής του μορίου που συνεισφέρουν ενεργειακά (βαθμοί ελευθερίας στην περιστροφική κίνηση) ?

**Απάντηση.** Τα διατομικά μόρια έχουν μόνο δυο δυνατότητες περιστροφής (δυο βαθμούς ελευθερίας). Μια γύρω από τον άξονα  $Z$  και μια γύρω από τον άξονα  $\psi$ .

Αυτές οι περιστροφές μπορούν να συνεισφέρουν στην ενέργεια του μορίου.

Η περιστροφή στον άξονα  $\chi$  δεν προσφέρει ενεργειακά, διότι η μάζα του μορίου είναι συγκεντρωμένη πάνω στον  $\chi$  οι γεωμετρικές διαστάσεις των ατόμων αμελητέες άρα και η ροπή αδράνειας του μηδενική.



**Ερώτημα 2.** Πόση είναι η κινητική ενέργεια εξ αιτίας της περιστροφής του μορίου σύμφωνα με την **κλασική μηχανική** σε συνάρτηση με την στροφορμή και την ροπή αδράνειας του μορίου ?.

**Απάντηση**

Η κινητική ενέργεια εξ αιτίας της περιστροφής του μορίου  $K_{περ} = 1/2 I_{cm} \omega^2$  αλλά  $L = I_{cm} \omega$  άρα  $K_{περ} = L^2 / 2I_{cm}$ .

Παρατηρούμε ότι σύμφωνα με την **κλασική μηχανική** η  $K_{περ}$  μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή αφού η **στροφορμή** μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή.

**Ερώτημα 3.** Να υπολογιστεί η κινητική ενέργεια εξ αιτίας της περιστροφής του μορίου σύμφωνα με την **κβαντική μηχανική**. Τι συμπέρασμα προκύπτει ?

**Απάντηση** Είναι γνωστό ότι τα μόρια (όπως και τα άτομα) δίνουν **γραμμικά φάσματα**. Έτσι σύμφωνα με την κβαντική μηχανική η στροφορμή παίρνει μόνο **ορισμένες επιτρεπτές τιμές** δηλαδή είναι **κβαντισμένη**.

Οι τιμές της είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του  $h/2\pi = \hbar$ .

Η σχέση που δίνει την στροφορμή είναι :  $L = \sqrt{j(j+1)} \hbar$  όπου  $j = 0, 1, 2, 3, \dots$  και ονομάζεται **κβαντικός αριθμός περιστροφής** και  $\hbar = h/2\pi$  (h μπαρ)

Ο τύπος της κινητικής ενέργειας  $K_{περ} = L^2 / 2I_{cm}$  μπορεί να γίνει :

$$K_{περ} = \frac{\hbar^2}{2I_{cm}} j(j+1) \text{ με } j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

**Συμπέρασμα**

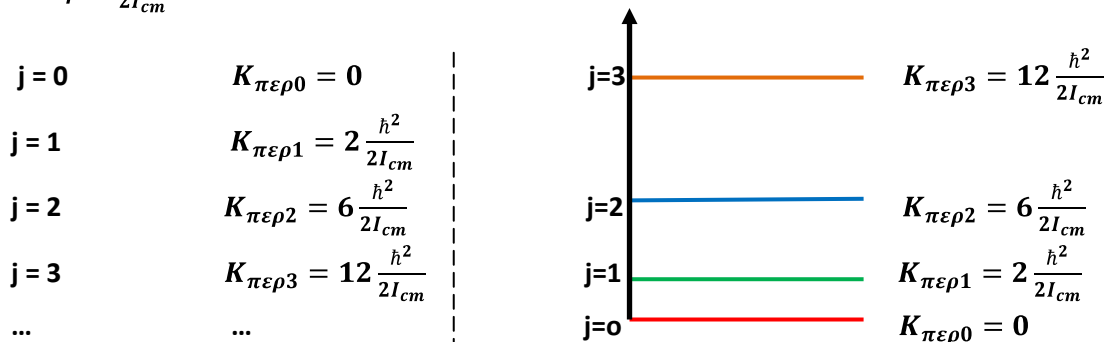
**α.** Η κινητική ενέργεια της περιστροφής του μορίου **είναι κβαντισμένη**.

**β.** Εξαρτάται από **την ροπή αδράνειας του μορίου** ως προς άξονα περιστροφής του.

**Ερώτημα 4.** Να γίνει το ενεργειακό διάγραμμα του μορίου που δείχνει τις **επιτρεπτές τιμές** της κινητικής ενέργειας εξ αιτίας της περιστροφής του μορίου  $K_{περ}$ .

**Απάντηση :** Η εξίσωση κινητικής ενέργειας περιστροφής του μορίου

$$K_{περ} = \frac{\hbar^2}{2I_{cm}} j(j+1) \text{ δίνει τις παρακάτω τιμές για } j = 0, 1, 2, 3, \dots$$



**Ερώτημα 5.** Να υπολογιστεί η απόσταση μεταξύ δυο διαδοχικών ενεργειακών σταθμών. Ποια είναι η φυσική ερμηνεία της ?

**Απάντηση.**

Η απόσταση μεταξύ δυο διαδοχικών ενεργειακών σταθμών δίνεται από την σχέση :

$$\Delta K_{\text{περ}} = K_{\pi j} - K_{\pi(j-1)} \Rightarrow \Delta K_{\text{περ}} = \frac{\hbar^2}{2I_{cm}} j(j+1) - \frac{\hbar^2}{2I_{cm}} j(j-1)$$

$$\Delta K_{\text{περ}} = \frac{\hbar^2}{I_{cm}} j$$

το  $j = 0$  κβαντικός αριθμός που περιγράφει την κατάσταση της **υψηλότερης ενέργειας**. Η απόσταση αυτή  $\Delta K_{\text{περ}}$  μας δίνει την ενέργεια του φωτονίου **που απορροφάται** από το μόριο κατά την μετάβαση από την ενεργειακή στάθμη  $(j-1)$  στην στάθμη  $(j)$ . Επίσης μας δίνει την ενέργεια του φωτονίου **που εκπέμπεται** από το μόριο κατά την μετάβαση από την ενεργειακή στάθμη  $(j)$  στην στάθμη  $(j-1)$ .

**Ερώτημα 6.** Υπολογίστε την συχνότητα του φωτονίου που απορροφάται η εκλύεται κατά την μετάβαση από την ενεργειακή στάθμη  $(j-1)$  στην στάθμη  $(j)$  η αντίστροφα. Σε ποιες γνωστές συχνότητες αντιστοιχούν ?

**Απάντηση.** Υπολογίσαμε ότι απόσταση μεταξύ δυο διαδοχικών ενεργειακών σταθμών

$$\text{δίνεται από την σχέση : } \Delta K_{\text{περ}} = \frac{\hbar^2}{I_{cm}} j \text{ αλλά } \Delta K_{\text{περ}} = hf \Rightarrow$$

$$f = \frac{h}{4\pi^2 I_{cm}} j.$$

Για μετάβαση από την  $j = 0$  στην  $j = 1$  η  $f_1 = \frac{h}{4\pi^2 I_{cm}}$  όμοια  $f_2 = 2f_1 \dots$

Οι θεωρητικές αυτές προβλέψεις συμφωνούν απόλυτα με τις πειραματικές μετρήσεις που παίρνουμε από το φάσμα απορρόφησης η εκπομπής του μορίου.

Οι μετρήσεις των φασματικών γραμμών έδειξαν ότι οι συχνότητες των φωτονίων αντιστοιχούν σε συχνότητες μικροκυμάτων (περίπου  $10^{11}$  Hz).

### **Πειραματικός υπολογισμός της ροπής αδρανείας του μορίου ( $I_{cm}$ ) και της απόστασης των ατόμων ( $r$ ) του μορίου.**

Πειραματικά υπολογίσαμε από το φάσμα απορρόφησης την  $f_1 = 1.15 \times 10^{11} \text{ Hz}$  για το μόριο του CO.

Να υπολογιστεί η **ροπή αδράνειας** του μορίου  $I_{cm}$  και η **απόσταση των ατόμων** C και O. Γνωστά:  $h, m_c, m_o$ .

**Απάντηση** Βρήκαμε ότι η  $f_1 = \frac{h}{4\pi^2 I_{cm}} \Rightarrow I_{cm} = \frac{h}{4\pi^2 f_1}$  αν αντικαταστήσω έχω

$$I_{cm} = 1.46 \times 10^{-46} \text{ kgr} \cdot \text{m}^2.$$

Σε προηγούμενη ανάρτηση ([Η ΕΛΑΧΙΣΤΗ ΡΟΠΗ ΑΔΡΑΝΕΙΑΣ ΚΑΙ Ο ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΚΕΝΤΡΟΥ ΜΑΖΑΣ](#)) είχα υπολογίσει το κέντρο μάζας και την ροπή αδράνειας όμοιου συστήματος που είναι :

$$I_{cm} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r^2$$

Για το μόριο του CO :  $I_{cm} = \frac{m_c m_o}{m_c + m_o} r^2 \Rightarrow r = 0.113 \text{ nm}.$

