

姓名: \_\_\_\_\_ 学号: \_\_\_\_\_ 成绩: \_\_\_\_\_

《原子物理》测试题 —————第五章

选择题 (18分)

1. 氢分子中两个氢原子核的间距大约为 C  
A. 0.001nm B. 0.01nm, C. 0.1nm D 1nm
2. 下列哪种能级的间距最小 A  
A. 分子转动能级 B. 分子振动能级 C. 分子电子能级 D. 原子的电子能级
3. 在双原子分子的带状光谱中, 有些谱带具有这样的特征: 一边(称谱带头)密集而朝另一边展开且逐渐减弱, 有关具有这样特征带的组成, 下列哪个说法是明显错误的: D  $B \approx B'$  (教材P215)  
A. 振转谱带中(即没有电子跃迁)一般不会出现具有这样特征的带;  
B. 由不同转动能级组间的跃迁产生的带光谱, 组成各谱带的谱线彼此分开;  
C. 谱带头可以出现在光谱低波数即红端。  
D. 无论什么光谱带, 谱带头必定在同一组转动量子数间跃迁产生。
4. 设  ${}^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  和  ${}^2\text{H}^{35}\text{Cl}$  两种分子的力常量相同, 则两种分子的经典振动频率之比  $\nu_{{}^1\text{H}^{35}\text{Cl}}/\nu_{{}^2\text{H}^{35}\text{Cl}}$  为: A  $\nu \propto \frac{1}{\mu} \cdot \sqrt{\frac{2 \times 35}{2+35}} = \sqrt{\frac{72}{37}}$   
A.  $\sqrt{\frac{72}{37}}$  B.  $\sqrt{\frac{36}{37}}$  C.  $\sqrt{\frac{37}{36}}$  D.  $\sqrt{\frac{37}{72}}$
5. 同核双原子分子的电偶极矩为 0, 欲对其振转光谱观测, 则下列哪种方法正确: B  
A. 可用红外谱仪 B. 可用拉曼谱仪 C. 不能观测 D. X 射线谱仪
6. 对于“分子轨道”的定义, 下列叙述中正确的是 B  
A. 分子中电子在空间运动的波函数  
B. 分子中单个电子空间运动的波函数  
C. 分子中单电子完全波函数(包括空间运动和自旋运动)  
D. 原子轨道线性组合的新轨道

填空题 (15分)  $\frac{1}{2}hc\tilde{\nu}_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} J(J+1) \Rightarrow J(J+1) = 72$

7. 已知氢分子核间距为 0.0741 nm, 经典振动波数  $\tilde{\nu}_0 = 879040 \text{ m}^{-1}$ 。则转动量子数  $J$  等于 8 时的纯转动能级的能量可以恰好赶上振动量子数  $v = 0$  时振动能级的能量。
8. 拉曼散射实验的一个特点是入射光的波长不受限制, 可使用紫外光或可见光或红外光等光源来研究分子的 振动和转动 能级结构。斯托克斯线和反斯托克斯线总是对原谱线波数作对称分布, 附加波数和 入射光波数 无关, 只与 散射物质特性 有关。
9. 已知  ${}^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  分子的基频带波数为  $2886.19 \text{ cm}^{-1}$ , 则  ${}^1\text{H}^{37}\text{Cl}$  分子相应的基频带的波数为  $2884.02 \text{ cm}^{-1}$ 。

$$\frac{\nu_1}{\nu_2} = \sqrt{\frac{\frac{1 \times 37}{1+37}}{\frac{1 \times 35}{1+35}}} = \sqrt{\frac{37 \times 36}{35 \times 38}}$$

10. 质量分别为  $m_1$  和  $m_2$ , 核间距为  $r$  的双原子分子的转动能为  $\frac{\hbar^2}{2 \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r^2} J(J+1)$ 。

11. CO 的近红外光谱中, 有一个  $2144 \text{ cm}^{-1}$  的强带, 则 CO 零点能约为  $2.13 \times 10^{-20}$  焦耳。  
 $\frac{1}{2} h c \tilde{\nu}_0$

### 计算题

12. (8分)  $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$  分子的键长  $R_0 = 0.1128 \text{ nm}$ .

(1) 该分子纯转动谱线的间隔是多少?

(2) 若测量该分子的拉曼散射, 计算小拉曼位移光谱线的间隔以及第一条反斯托克斯线与第一条斯托克斯线之间的波数差。

$$(1) \Delta \tilde{\nu}_1 = 2B = 2 \times \frac{\hbar}{4\pi^2 \mu R_0^2 c} = 365.365 \text{ m}^{-1}$$

$$(2) \Delta \tilde{\nu}_2 = 12B = 2192.19 \text{ m}^{-1}$$

13. (9分) 由  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  振动光谱测得其最强吸收带和相邻吸收带带心的波数分别为  $2885.9 \text{ cm}^{-1}$  和  $5668.0 \text{ cm}^{-1}$ , (1) 求非谐性常数; (2) 求力常数

$$(1) \begin{aligned} \tilde{\nu}_0 - 2\eta\tilde{\nu}_0 &= 2885.9 \text{ cm}^{-1} \\ 2\tilde{\nu}_0 - 6\eta\tilde{\nu}_0 &= 5668.0 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{1-2\eta}{2-6\eta} = \frac{2885.9 \text{ cm}^{-1}}{5668.0 \text{ cm}^{-1}}$$

$$\Rightarrow \eta = 0.01736$$

$$\tilde{\nu}_0 = 2989.7 \text{ cm}^{-1}$$

$$(2) k = 4\pi^2 \mu \tilde{\nu}_0^2 = 515.73 \text{ N/m}$$