

Энергетические уровни молекулы в гармоническом приближении

Энергия молекулы складывается из трех частей:

$$E = E_e + E_v + E_r \quad (1)$$

E_e – энергия, обусловленная электронной конфигурацией

E_v – энергия, соответствующая колебаниям молекулы

E_r – энергия, соответствующая вращениям молекулы

Энергия квантового осциллятора:

$$E_v = (v + 1/2)\hbar\omega_v \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

v – колебательное квантовое число с правилом отбора $\Delta v = \pm 1$.

Энергия системы с моментом инерции I и вращающейся с угловой скоростью ω_r равна

$$E_r = \frac{I\omega_r^2}{2} = \frac{(I\omega_r)^2}{2I} = \frac{M^2}{2I} \quad (3)$$

Момент импульса может принимать лишь дискретные значения:

$$M = \hbar\sqrt{J(J+1)} \quad J = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

Поэтому вращательная энергия молекулы может принимать значения:

$$E_r = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I} \quad (5)$$

Для вращательного числа есть правило отбора $\Delta J = \pm 1$