

Física Contemporánea

Guía 2 – 2024

Física Molecular – Espectros Moleculares

Problema 1. La separación entre líneas del espectro rotacional puro de HCl es $6,35 \times 10^{11}$ Hz. Determine la separación internuclear de esta molécula.

Problema 2. Calcule la energía de los tres primeros niveles rotacionales de la molécula CO. Determine la longitud de onda de los fotones absorbidos en las transiciones entre estos niveles de energía. La longitud de enlace de la molécula es $1,13 \text{ \AA}$.

Problema 3. Una molécula diatómica no es rigurosamente rígida, por lo que la distancia internuclear aumenta a medida que aumenta su momento angular (efecto de distorsión centrífuga).

- a) Analice cómo afecta este estiramiento a los niveles de energía rotacional.
- b) Una expresión empírica para la energía rotacional, considerando el efecto de distorsión centrífuga es la siguiente:

$$E_l = Bl(l+1) - Dl^2(l+1)^2$$

Encuentre una expresión para la constante de distorsión centrífuga D . Considere un modelo en el que la fuerza de ligadura obedece la ley de Hook con una constante de fuerza k y que los desplazamientos respecto de la separación de equilibrio son pequeños.

- c) Encuentre una expresión para las frecuencias correspondientes a las transiciones entre los niveles rotacionales.

Problema 4. Evalúe la energía de punto cero para la molécula Ar_2 a partir del potencial de Lennard–Jones 12–6.

Repita el cálculo anterior para la molécula He_2 . A partir de este resultado, discuta sobre la posibilidad de formarse una molécula de helio.

Los parámetros del potencial de Lennard–Jones para Ar y He son $\sigma = 0,340 \text{ nm}$, $\epsilon = 10,5 \text{ meV}$ y $\sigma = 0,256 \text{ nm}$, $\epsilon = 0,879 \text{ meV}$, respectivamente.

Problema 5. Para muchas moléculas ligadas covalentemente, la energía potencial se puede describir adecuadamente por medio del potencial de Morse:

$$V(R) = A [e^{-2a(R-R_0)} - 2e^{-a(R-R_0)}]$$

donde A , a y R_0 son parámetros característicos de cada molécula.

La separación internuclear de la molécula CO es 0,113 nm, la energía de disociación es 9,60 eV y la frecuencia vibracional $6,51 \times 10^{13}$ Hz. A partir de estos datos experimentales determine el potencial de Morse para la interacción entre carbono y oxígeno.

Problema 6. Analice la forma espectral para transiciones electrónicas moleculares en el caso de absorción. Considere que las constantes rotacionales correspondientes a los niveles electrónicos inicial y final son $B = 2,5 \times 10^{-3} \Delta E_{ev}$ y $B' = 2 \times 10^{-3} \Delta E_{ev}$, respectivamente. ΔE_{ev} es el cambio en la energía electrónica y vibracional en la transición. Grafique la energía de las líneas espectrales para las bandas R y P en función de l . Observe que la banda R posee un máximo (denominada "cabeza de banda") y que ambas bandas se degradan (la separación entre líneas espectrales se incrementa) a medida que aumenta l .