

Espectroscopía molecular

3. Especificar cuáles de las siguientes moléculas tienen espectro a) rotacional de microondas, b) rotacional Raman, c) vibracional infrarrojo y d) vibracional Raman: H_2O , NH_3 , N_2O , CH_4 .
4. *Anharmonicidad de vibraciones y profundidad de potencial en moléculas diatómicas.*
 - (a) Elijan alguna molécula diatómica, y especifique los parámetros que caracterizan los estados de vibración de su estado fundamental electrónico utilizando las tablas de Herzberg.
 - (b) Considerando la profundidad del potencial y sin considerar las anharmonicidades, ¿cuál sería el estado vibracional más grande?
 - (c) Repitan lo anterior pero considerando las anharmonicidades.
 - (d) ¿Cuál es la diferencia de energía entre los primeros dos estados de vibración y entre el quinto y el sexto? ¿Creen que se vería esta diferencia en un espectro?
 - (e) Dibujen esquemáticamente el potencial internuclear y los niveles de energía.
5. Considere la molécula de CO_2 como un rotor rígido.
 - (a) Calcule su momento de inercia. Considere la distancia intermolecular $R = 116.3$ pm.
 - (b) Calcule su término rotacional y la energía de rotación para los primeros 4 J posibles.
 - (c) Dibuje la población de los niveles rotacionales a $T = 300$ K, considerando $N = 1$ y $g_j = 2j + 1$. Estime J_{max} .
6. *Espectro vibracional de una molécula diatómica lineal.*
 - (a) Elijan una molécula lineal heteronuclear. Busquen su largo de enlace r_e y calculen su frecuencia de rotación.
 - (b) ¿A qué temperatura esperan que más del 99% de la población molecular esté en el estado fundamental de rotación?
 - (c) ¿Que modo de rotación esperan que sea más prominente a temperatura ambiente?
 - (d) Esquematicen la forma del espectro esperado.
7. Consideren la molécula lineal de CO_2 .
 - (a) Esquematicen los modos de vibración normales que esperan. ¿Cuántos hay? Etiquétenlos, según lo que hacen, como "de respiración", "egipcio" y "de torsión".
 - (b) El modo de respiración y el egipcio tienen energías de 1388 y 2349 cm^{-1} respectivamente. Comprueben si, diagonalizando un modelo secillo de osciladores armónicos unidimensionales, la relación entre estas frecuencias es la esperada.