

QUÍMICA FÍSICA II. CURSO 2009-2010. SERIE L06

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA MOLECULAR. MOLÉCULAS DIATÓMICAS

- 1- Se observan en el nivel vibracional $v = 0$ del H^{79}Br tres líneas $J \rightarrow J+1$ consecutivas a 84.544, 101.355 y 118.111 cm^{-1} , respectivamente. Asignar a cada una de ellas el valor de J y determinar para la molécula los valores de B_e y R_e dentro del modelo de oscilador armónico-rotor rígido.
- 2- Una mejora del modelo de oscilador armónico introduce un término de anarmonicidad del tipo $-h\nu_e x_e (v + \frac{1}{2})^2$, donde $\nu_e x_e$ es la constante de anarmonicidad. Añadiendo esta corrección a la expresión de la energía vibracional obtenida en clase, calcular ν_e , $\nu_e x_e$ y la constante de fuerza de la molécula $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ si las transiciones fundamental ($0 \rightarrow 1$) y primer armónico ($0 \rightarrow 2$) están centradas en 1876.06 cm^{-1} y 3724.20 cm^{-1} , respectivamente.
- 3- A partir de los datos de la tabla siguiente, obtenidos en el espectro de rotación-vibración del H^{79}Br , determinar B_e y ν_e . Si la distancia de equilibrio y la constante de fuerza del enlace presente en $^6\text{LiF}^{19}$ toman los valores $R_e = 1.560 \text{ \AA}$ y $k_e = 250.0 \text{ N/m}$, discutir cual de las dos moléculas tiene un enlace más fuerte.

Transición	ν (cm^{-1})
R(0)	2642.60
P(1)	2609.67

- 4- Determinar la configuración electrónica de orbitales moleculares para las moléculas B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , LiF y HF .