

# Ejemplo 9.3 *Calculo de una frecuencia de absorción vibracional molecular*

1-. En una molécula los átomos vibran y los enlaces se modelan como los muelles (o resortes)

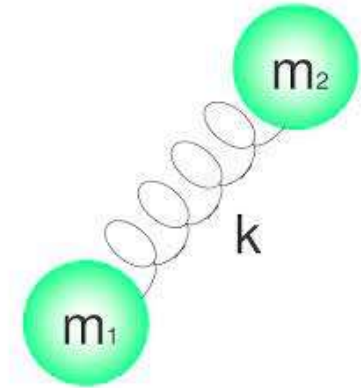
2-. Consideremos una molécula diatómica X-H donde X es suficientemente grande como para no moverse y H oscila a su lado

3-. Podemos obtener los niveles energéticos de esa oscilación o vibración mediante las ecuaciones:

$$E_v = \left( v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad \omega = \left( \frac{k}{m} \right)^{1/2} \quad v = 0, 1, 2, \dots$$

La constante de fuerza típicamente oscila un valor de  $k = 500 \text{ N m}^{-1}$  y la masa del protón es de:  $1.7 \times 10^{-27} \text{ kg}$

$$\omega = \left( \frac{500 \text{ N m}^{-1}}{1.7 \times 10^{-27}} \right)^{\frac{1}{2}} = 5.4 \times 10^{14} \text{ Hz} \quad \Delta E = E_{v+1} - E_v = \hbar \omega = 5.7 \times 10^{-20} \text{ J} \approx 0.36 \text{ eV}$$



# Ejemplo desarrollado 9.4

## Normalización de las funciones de onda del oscilador armónico

Las funciones de onda para el oscilador vienen dadas por:

$$\psi_v(y) = N_v H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad y = \frac{x}{\alpha} \quad \alpha = \left( \frac{\hbar^2}{mk} \right)^{1/4}$$

Para normalizar la función de onda  $\psi$  debemos encontrar  $N = Q^{-\frac{1}{2}}$

$$Q = \langle \psi | \psi \rangle = \int \psi^* \psi d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_v^* \psi_v dy = \int_{-\infty}^{\infty} H_v^2(y) e^{-y^2} dy = \pi^{1/2} 2^v v!$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_{v'} H_v e^{-y^2} dy = \begin{cases} 0 & \text{if } v' \neq v \\ \pi^{1/2} 2^v v! & \text{if } v' = v \end{cases}$$

$$N_v = Q^{-\frac{1}{2}} = \left( \pi^{1/2} 2^v v! \right)^{-\frac{1}{2}}$$

Por lo tanto la función de onda normalizada es:

$$\psi_v'(y) = \left( \pi^{1/2} 2^v v! \right)^{-\frac{1}{2}} H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

# Ejemplo desarrollado 9.5

## Cálculo de las propiedades de un oscilador armónico

Calcule el desplazamiento medio de un oscilador cuando esta en un estado cuántico  $v$ .

$$\psi_v(y) = N_v H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$\langle x \rangle = \langle \psi_v | x | \psi_v \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_v^* x \psi_v dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left( N_v H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \right)^* x N_v H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}} dx$$

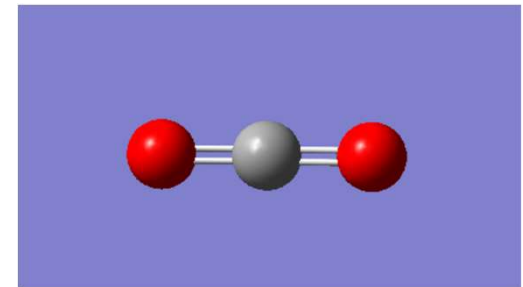
$$= N_v^2 \alpha \int_{-\infty}^{\infty} H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}} x H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}} dy = N_v^2 \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}} y H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}} dy$$

$$= N_v^2 \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_v(y) y H_v(y) e^{-y^2} dy$$

$$= N_v^2 \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_v(y) \left( v H_{v-1} + \frac{1}{2} H_{v+1} \right) e^{-y^2} dy$$

$$= N_v^2 \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_v(y) v H_{v-1} e^{-y^2} dy + N_v^2 \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_v(y) \left( \frac{1}{2} H_{v+1} \right) e^{-y^2} dy$$

$$= N_v^2 \alpha^2 v \int_{-\infty}^{\infty} H_v(y) H_{v-1} e^{-y^2} dy + \frac{N_v^2 \alpha^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} H_v(y) H_{v+1}(y) e^{-y^2} dy = 0$$



$$y = \frac{x}{\alpha} \quad \alpha = \left( \frac{\hbar^2}{mk} \right)^{1/4}$$

Relación de recurrencia

$$y H_v(y) = v H_{v-1} + \frac{1}{2} H_{v+1}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_{v'} H_v e^{-y^2} dy = \begin{cases} 0 & \text{if } v' \neq v \\ \pi^{1/2} 2^v v! & \text{if } v' = v \end{cases}$$

Para el átomo de H

$$1.008g = 6.022 \times 10^{23} \text{ átomos}$$
$$X = 1 \text{ átomo}$$

$$1.008 \frac{g}{mol} * \frac{1mol}{1N_A} * \frac{1N_A}{6.022 \times 10^{23} \text{ átomos}} * \frac{1kg}{1000g} = 1.674 \times 10^{-27} kg / \text{átomo H}$$

## Ejemplo 9.4

### Cálculo de la frecuencia de una transición rotacional molecular

Para resolver este sistema consideramos un modelo de la partícula en una esfera si suponemos que tenemos un átomo central fijo y el otro átomo viaja alrededor de él a una distancia promedio fija y de forma libre.

Por ejemplo la molécula HI:  $^1H-^{127}I$  puede ser modelado de esta forma a una distancia de equilibrio en  $r=160\text{pm}$

El momento de inercia de esta molécula es  $I = m_H r^2 = 1.674 \times 10^{-27} kg * (160 \times 10^{-12} m)^2 = 4.28 \times 10^{-47} kg m^2$

$$E_l = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2I} \text{ con } l = 0, 1, 2, \dots \text{ (número cuántico del momento angular orbital)}$$

$$\Delta E = E_{l \rightarrow l+1} = E_{l+1} - E_l = (l+1)(l+2) \frac{\hbar^2}{2I} - l(l+1) \frac{\hbar^2}{2I} = 2(l+1) \frac{\hbar^2}{2I} = (l+1) \frac{\hbar^2}{I}$$

$$\text{Para } l = 0 \text{ a } l = 1 \text{ tenemos: } \Delta E = \left( \frac{\hbar^2}{I} \right) = \left( \frac{(1.054 \times 10^{-34} Js)^2}{4.28 \times 10^{-47} kg m^2} \right) = 2.59 \times 10^{-22} J$$

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{2.59 \times 10^{-22} J}{6.626 \times 10^{-34} Js} = 3.92 \times 10^{11} Hz \Rightarrow \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 \frac{m}{s}}{3.92 \times 10^{11} Hz} = 7.65 \times 10^{-4} m$$