

## Tema 7: Espectroscopia Rotacional y Vibracional

1. Calcule la relación de los coeficientes de Einstein de emisión espontánea y estimulada, A y B, para transiciones con las siguientes características: a) radiación de radiofrecuencia a 500 MHz, b) radiación de microondas a 3,0 cm.
2. Estime el tiempo de vida de un estado que da origen a una línea de ancho a) 100 MHz, b)  $2,14 \text{ cm}^{-1}$ .
3. Calcule la frecuencia de transición  $J = 3 \leftarrow 2$  en el espectro rotacional puro de  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ . La longitud de enlace de equilibrio es 112,81 pm.
4. Si el número de onda de la transición rotacional  $J = 1 \leftarrow 0$  del  $^1\text{H}^{81}\text{Br}$  considerado como rotor rígido es  $16,93 \text{ cm}^{-1}$ , ¿cuál es a) el momento de inercia de la molécula, b) la longitud de enlace?
5. El número de onda de la radiación incidente en un espectrofotómetro Raman es  $20623 \text{ cm}^{-1}$ . ¿Cuál es el número de onda de la radiación Stokes dispersada para la transición  $J = 4 \leftarrow 2$  del  $^{16}\text{O}_2$ ?  $B=1,4457 \text{ cm}^{-1}$ .
6. El espectro rotacional Raman del  $^{19}\text{F}_2$  muestra una serie de líneas Stokes separadas por  $3,5312 \text{ cm}^{-1}$  y una serie similar de líneas anti-Stokes. Calcule la longitud de enlace de la molécula.
7. ¿Cuáles de las siguientes moléculas pueden presentar un espectro de absorción de microondas rotacional puro?  
a)  $\text{H}_2\text{O}$                       b)  $\text{H}_2\text{O}_2$                       c)  $\text{NH}_3$                       d)  $\text{N}_2\text{O}$
8. ¿Cuáles de las siguientes moléculas pueden presentar un espectro Raman rotacional puro?  
a)  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$                       b)  $\text{CH}_3\text{CH}_3$                       c)  $\text{SF}_6$                       d)  $\text{N}_2\text{O}$
9. Calcule la longitud de onda del fotón necesaria para excitar la transición entre niveles de energía vecinos en un oscilador armónico de masa efectiva igual a la de un átomo de oxígeno ( $15,9949 \text{ u}$ ) y constante de fuerza  $544 \text{ N m}^{-1}$ . Calcule la longitud de onda si se duplica la masa.
10. Suponiendo que las vibraciones de una molécula de  $^{14}\text{N}_2$  son equivalentes a las de un oscilador armónicos con constante de fuerza  $k = 2293,8 \text{ N m}^{-1}$ , ¿cuál será la energía del punto cero de la vibración de esa molécula?
11. El número de onda de la transición vibracional fundamental de  $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}$  es  $323,2 \text{ cm}^{-1}$ . Calcule la constante de fuerza del enlace.
12. Calcule la relación entre las energías del punto cero de la vibración de un enlace C-H y un enlace C-D. Deberá suponer que las constantes de fuerza para las vibraciones C-H y C-D son iguales.