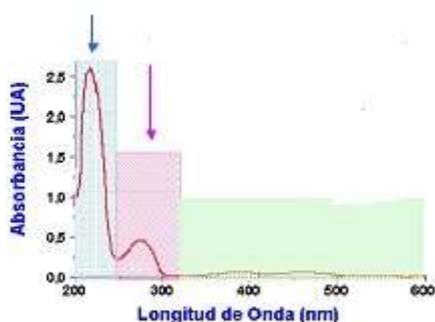


Fundamentos de espectroscopia molecular

Segundo parcial de promoción 13/11/13

- 1) En un espectro las transiciones entre niveles se observan como picos o bandas de absorción. Explique de qué depende su:
 - * ubicación
 - * intensidad
 - 2) El espectro IR de la molécula de $^1\text{H}^{80}\text{Br}$ se observa una serie de picos consecutivos a los siguientes números de onda en cm^{-1} 2508.18, 2525.12, 2542.06, 2575.94, 2592.88 y 2609.82.
 - a) Indique con un esquema a qué transiciones corresponden dichos picos. Indicar la rama (P o R) a la que pertenece cada pico.
 - b) Determine el número de onda que correspondería a la transición vibracional pura entre el estado fundamental vibracional y el primer estado excitado. Calcule, a partir de este valor, la diferencia de energía entre dichos niveles expresada en Joules y la relación entre las poblaciones de los dos niveles (N'/N) a 298K.
 - c) Calcule la constante de fuerza (k) del enlace.
 - d) Determine la constante rotacional B. Calcule el momento de inercia y la longitud del enlace. Considere que el momento de inercia de la molécula es el mismo en los estados vibracionales superior e inferior.
 - e) Indique cuáles son las características de la molécula de HBr que permiten que se observen dichos picos en el espectro IR. ¿Puede determinar cuál es el estado de agregación del HBr en el momento de realizar el experimento?
 - f) ¿A qué frecuencia aparecerá el primer sobretono?

Datos: $E_v = (v + \frac{1}{2}) \hbar\omega_0$ donde $v = 0,1,2, \dots$ y $\omega_0 = (k/\mu)^{1/2}$
 $E_j = (\hbar^2/2I) j(j+1)$ donde $j = 0,1,2,3, \dots$ e $I = \mu r^2$ es el momento de inercia de la molécula respecto al eje de rotación, μ la masa reducida y r la distancia de enlace
Constante rotacional $B = (\hbar^2/2I)/hc$. Separación entre las bandas rotacionales es $2B$
Distribución de Boltzmann $N'/N = g e^{-\Delta E/kT}$ donde $g = 2j+1$ y $\Delta E = 2(j+1)hcB$
 - 3) Explique brevemente para espectroscopia Raman
 - a) ¿Cuál es la diferencia con la espectroscopia de absorción?
 - b) Enuncie la regla global de selección para que se registre un espectro Raman
 - c) Indique con un esquema de niveles a qué se llama Raman Stokes y anti Stokes
 - 4) a) ¿Cuántos modos de vibración tienen las siguientes moléculas: CO_2 , H_2 , HBr y H_2O ¿Cuales se observarán en un espectro IR? ¿Por qué? ¿Cuáles se verán en Raman?
 - 5) Dado un sistema de 10 enlaces dobles conjugados y considerando los niveles de energía para electrones π en un sistema conjugado por el modelo de pozo de potencial infinito $E_n = n^2\hbar^2/8m_eL^2$. Encuentre la expresión de la diferencia de energía entre el LUMO y el HOMO y el valor de la longitud de onda de la radiación que pueda producir esa transición.
 $L = 1.4 \text{ \AA} (k + 2)$ donde k es el número de enlaces conjugados.
- a) Indique en un esquema las características de una transición UV- vis y enuncie las reglas de selección. ¿A qué se llama espectroscopia UV vacío y por qué?
 - ...b) Explique por qué un extracto alcoholico de hojas se ve verde
 - c) La figura corresponde a los espectros de UV-vis de una proteína indique a que grupos corresponde las flechas marcadas.



DATOS:

$$k = 1.38066 \times 10^{-23} \text{ J/K}^{-1}, \quad h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}, \quad c = 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}, \quad m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$