

Problema 3: Molécula Diatómica.

Una molécula diatómica consta de dos átomos enlazados químicamente. Estos enlaces químicos sólo pueden estudiarse con exactitud utilizando mecánica cuántica. Sin embargo, se pueden hacer aproximaciones de mecánica clásica adecuadas para varias aplicaciones.

Un modelo común de enlace diatómico es tratar la molécula como si los dos átomos estuvieran unidos por un resorte de constante k con una separación de equilibrio r_0 . Este modelo es muy usado para estudiar las vibraciones moleculares de baja energía, pero falla cuando hay ruptura de enlaces o para vibraciones de alta energía. La energía potencial de este modelo, que se comporta como un oscilador armónico, se puede escribir como:

$$U(r) = \frac{1}{2} k(r - r_0)^2 ,$$

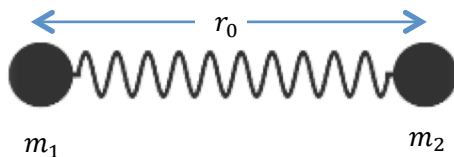
donde r es la separación instantánea entre los dos átomos. De la expresión anterior podemos obtener la magnitud de la fuerza entre los dos átomos:

$$F(r) = -k(r - r_0) .$$

Cuando se quiere modelar vibraciones de alta energía (o de alta amplitud) se puede recurrir al potencial de Morse:

$$U(r) = D_e [1 - e^{-a(r-r_0)}]^2$$

en donde D_e y a son constantes. Nótese que cuando la distancia interatómica crece hasta el infinito, la energía potencial tiende a D_e .



Representación de una molécula diatómica.

- a) Considere una molécula diatómica con átomos de masas m_1 y m_2 y separación de equilibrio r_0 . Determine la ubicación del centro de masas de la molécula respecto de m_1 . **(2 puntos)**
- b) Si esta molécula, supuesta rígida, gira con una velocidad angular ω alrededor de un eje perpendicular a la línea que une los átomos y pasa por su centro de masa, encuentre la expresión de la energía cinética rotacional en términos de m_1 , m_2 , r_0 y ω . **(2 puntos)**
- c) Suponga ahora que la molécula no rota pero sus átomos pueden vibrar. Determine su frecuencia angular de vibración ω_0 para bajas energías. **(2 puntos)**
- d) Un efecto muy estudiado en espectroscopía es el hecho de que el movimiento rotacional hace que la distancia entre los átomos aumente. Este fenómeno se conoce como *distorsión centrífuga*. Encuentre esta nueva distancia r'_0 en función de ω , ω_0 y r_0 , suponiendo que la molécula no vibra. **(2 puntos)**
- e) Para oscilaciones pequeñas el potencial de Morse se comporta de manera muy parecida al potencial del oscilador armónico. Encuentre la constante equivalente k en función de D_e y a para oscilaciones pequeñas del oscilador de Morse. **(2 puntos)**

Ayuda: $e^x \approx 1 + x$ para x muy pequeña.