

Espectroscopía Molecular. Curso 1999-2000.

Examen final. Julio de 2000

Completa, en letras mayúsculas, los datos personales que aparecen a continuación. Lee atentamente las preguntas y responde con claridad y concisión. Justifica, en cualquier caso, tus respuestas.

Nombre y apellidos		Grupo
Pregunta 1 (25 puntos)		
Pregunta 2 (25 puntos)		
Pregunta 4 (50 puntos)		

- (25 puntos)
 - Explica las diferencias entre los procesos de emisión espontánea y emisión estimulada.
 - Explica por qué la vida media de un estado excitado es finita. Obtén la expresión de la vida media de un estado excitado utilizando los coeficientes de Einstein.
 - Describe y explica brevemente los diferentes mecanismos que dan lugar al ensanchamiento de las líneas espectroscópicas.
 - Además de considerar a la radiación electromagnética desde un punto de vista clásico, hemos adoptado varias aproximaciones para simplificar la expresión de la interacción de la radiación con la materia. Di cuáles son y justifícalas.
- (25 puntos)
 - Escribe la expresión de la energía roto-vibracional de una molécula diatómica en la aproximación del rotor-rígido, oscilador armónico e incluyendo un término de anarmonicidad y otro de acoplamiento rotación-vibración. Utilízala en los apartados siguientes.
 - Obtén la expresión que proporciona las frecuencias de las bandas origen de las dos primeras bandas calientes de un espectro de rotación-vibración de una molécula diatómica.
 - Obtén la expresión que proporciona el espaciado entre dos líneas consecutivas de la rama R de un espectro de rotación-vibración.
 - Dibuja, razonadamente, el aspecto que tendrá la rama R de un espectro roto-vibracional.
 - Obtén la expresión que cumple el número cuántico J para que la intensidad de la línea correspondiente en un espectro de rotación pura sea máxima. Di cómo afecta la masa de la molécula diatómica a ese valor de J.
- (50 puntos) Considera la molécula $(\text{MgO})_3$ en la que los átomos de Mg y O se distribuyen alternativamente en los vértices de un hexágono regular. El único parámetro geométrico que caracteriza esta molécula es la distancia Mg-O, $d = d_{\text{Mg-O}}$.
 - Utiliza argumentos de simetría para justificar la posición del centro de masas y la localización de los ejes principales de inercia de esta molécula.
 - Obtén las expresiones de los tres momentos principales de inercia de la molécula en función de las masas atómicas y del parámetro d . Di qué tipo de trompo es esta molécula.
 - Demuestra que para toda molécula plana el momento de inercia respecto al eje perpendicular al plano molecular es igual a la suma de los otros dos. Comprueba este resultado en el $(\text{MgO})_3$.
 - A partir del hamiltoniano rotacional, $\hat{\mathcal{H}} = \hat{L}_a/2I_a + \hat{L}_b/2I_b + \hat{L}_c/2I_c$, deduce la expresión general de los niveles de energía de la molécula $(\text{MgO})_3$.
 - Escribe las expresiones de los cuatro niveles energéticos más bajos de esta molécula indicando la degeneración de cada uno de ellos.
 - Obtén la expresión de las frecuencias de absorción permitidas en esta molécula, sin considerar el valor de su momento dipolar.