Química Física II. Curso 2004-2005. Serie 00.
Herramientas

1. La energía potencial, $E(R)$, de la molécula de $^{35}Cl_2$ se puede expresar, en un pequeño rango en torno a la distancia de equilibrio, como una parábola $E(R) = A + BR + CR^2$, donde R es la distancia internuclear, $A = 6.89816 \times 10^{-18}$ J, $B = -6.535222 \times 10^{-8}$ J m^{-1} y $C = 164.3667$ J m^{-2}.

   (a) Determina la distancia de equilibrio, R_e, que corresponde al mínimo de la parábola. Expresa su valor en Å. Ten cuidado con las cifras significativas en éste y en los siguientes apartados.

   (b) Dibuja esta parábola y su primera derivada $E'(R) = dE(R)/dR$.

   (c) Determina la curvatura de la función $E(R)$ en el mínimo, $k_e = (d^2E/dR^2)_{R=R_e}$, y la energía en el mínimo $E(R = R_e)$.

   (d) La masa reducida de una molécula diatómica AB viene dada por $\mu = m_A m_B/(m_A + m_B)$, donde m_A y m_B son las masas de sus correspondientes núcleos. Calcula μ para la molécula $^{35}Cl_2$ y exprésala en unidades atómicas de masa y en kg. La masa del isótopo ^{35}Cl es 34.96885271 g/mol.

   (e) Calcula la frecuencia de vibración fundamental, $\nu_e = \frac{1}{2\pi}\sqrt{k_e/\mu}$, y exprésala en Hz.

   (f) Convierte ν_e al número de ondas correspondiente, expresado en cm^{-1}.

2. Una forma más apropiada de representar aproximadamente el potencial nuclear de una molécula diatómica es el potencial de Morse:

$$E(R) = D\left[1 - e^{\beta(R-R_e)/R_e}\right]^2.$$

   (a) Dibuja la forma de esta función.

   (b) Examina su comportamiento en el límite $R \to \infty$.

   (c) Determina la distancia de equilibrio, R_e, la constante de fuerza o curvatura en el mínimo, k_e, y la energía de disociación espectroscópica, $D_e = E(R \to \infty) - E(R_e)$.

3. Examina la función $x(t) = (e^{kt} - 1)/(a + be^{kt})$.

   (a) Dibuja la función para $t > 0$ si $a = 1$ y $b = 0.01$ y muestra que su comportamiento es el de una sigmoide.

   (b) Dibuja también $\dot{x}(t) = dx/dt$ y $\ddot{x}(t) = d^2x/dt^2$ en las mismas condiciones.

   (c) Encuentra, en función de a y b, la posición t_* a la que se encuentra el punto de inflexión de la curva, caracterizado porque $\ddot{x}(t_*) = 0$.

4. Encuentra el potencial de Morse, así como los polinomios de grado 2, 3, 4 y 6 que mejor se ajustan, en el sentido de los mínimos cuadrados, a los datos siguientes $E(R)$:

R	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	2.5
E	0.78255	0.40335	0.16446	0.03776	0.00000	0.03196	0.11784	0.24465	0.40177	2.18814