



Universitat d'Alacant
Universidad de Alicante

ESTRUCTURA DE LA MATERIA

**SIMULACIÓN Y ANÁLISIS DE ESPECTROS DE
MOLECULAS POLIATÓMICAS (MW E IR)**

Lucía Leal Ruiz de Lope
Juan Manuel Ruiz Muñoz
10 de diciembre de 2023

1. Objetivos

- Familiarizarse con la forma de los espectros de microondas e infrarrojo de moléculas triatómicas lineales y no lineales.
- Analizar los espectros experimentales para obtener información característica de cada molécula.

2. Introducción

En esta práctica vamos a trabajar con los espectros de moléculas. Estos espectros se generan debido a las transiciones electrónicas que dejan los electrones cuando realizan transiciones entre distintos niveles energéticos.

Estos tránsitos dependerán, en cada uno de los casos, de la molécula correspondiente puesto que estos dependerán de los grados de libertad de la misma.

La energía total de la molécula será el sumatorio de todas las energías, es decir, la molécula rotará, vibrará, trasladará y tendrá una determinada configuración electrónica.

Los tránsitos vibracionales se darán en el rango del infrarrojo mientras que los rotacionales en el microondas. Será por ello, por lo que a continuación estudiaremos los espectros de la molécula de cianuro de hidrógeno en estos dos rangos.

	Grados de libertad
Molécula lineal	$3N - 5$
Molécula no lineal	$3N - 6$

Cuadro 1: Grados de libertad según la molécula sea lineal o no. N es el número de átomos.

Para la comprensión correcta de estos tránsitos nos es necesario acudir y tener en cuenta conceptos de la mecánica cuántica, como es la cuantización de los niveles energéticos de un átomo y mismamente, la cuantización de la energía.

$$E = h\nu$$

Para que un electrón sea capaz de pasar de un orbital a otro, tendrá que ser excitado por radiación de una determinada frecuencia, ν , o bien, perder una cantidad discreta de energía, $h\nu$. Con ello, la diferencia de frecuencias, asociadas a los electrones en un determinado orbital, entre dos orbitales nos induce a que la energía emitida o absorbida por un electrón a promocionar de un orbital a otro sea $\Delta E = E_j - E_i = h\nu$.

3. Espectro de microondas, MW

Vamos a considerar que tenemos una molécula que su comportamiento se puede caracterizar por el de un rotor rígido, tal que sus momentos principales de inercia

son $I_x = 0$, $I_y = I_z = I$. Los autovalores, energías propias, asociadas a las rotaciones son de la forma;

$$E_J = \frac{h}{8\pi^2 I} J(J+1),$$

que podemos escribir como

$$E_J = BJ(J+1),$$

donde $B = \frac{h}{8\pi^2 I} = B(I)$ se conoce como la constante de rotación, que solo dependerá, en este caso, del momento de inercia, I , de la molécula.

Consideremos E_J y E_{J+1} entonces

$$E_{J+1} - E_J = B(J+1)(J+2) - BJ(J+1) = B(J+1)(J+2-J) = 2B(J+1),$$

que nos cuantifica el salto de energía $\forall J \in N \cup \{0\}$.

Haciendo uso de la expresión de la cuantización de la energía, que hemos comentado antes, podemos escribir

$$\nu = \frac{E_{J+1} - E_J}{h},$$

que será la frecuencia asociada al salto de energía. Podemos también, escribirlo en términos del número de onda, en cm^{-1} . Nos será suficiente con expresar la constante de rotación B , en dichas unidades $B(cm^{-1}) = \frac{B}{hc}$, donde h y c son la constante de Planck y la velocidad de la luz, respectivamente.

Con ello, lo que tenemos es;

$$\boxed{E_J = BJ(J+1)} \quad \boxed{\nu = 2B(J+1)}$$

Podemos observar sin mucha dificultad, que la separación entre líneas será constante pues,

$$\nu_{J+1} - \nu_J = 2B \equiv cte.$$

Podemos considerar un caso más general, donde no tuviéramos un rotor rígido deberíamos introducir un sumando asociado a la distorsión centrífuga del tal forma que los autovalores tendrían la forma que sigue:

$$E_J = BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2.$$

En tal caso, la distancia entre líneas deja de ser constante. Sin embargo, puesto que en nuestro caso vamos a suponer un rotor rígido no profundizaremos más en esto. Darnos cuenta, que estos resultados son idénticos entre moléculas poliatómicas lineales y moléculas diatómicas. Es por ello, que la expresión de las energías son idénticas. Las reglas de selección para estos casos es $\Delta J = \pm 1$.

3.1. Intensidad de las líneas

Para cuantificar la intensidad de las líneas que vamos a obtener con el programa debemos tener en cuenta que ésta dependerá de dos factores:

- De la magnitud de interacción de la radiación electromagnética con la molécula, es decir, de la probabilidad de que se produzca la transición.

- De la población del nivel de partida

$$\frac{n_i}{N} = A \cdot g_i \cdot e^{-E_i/KT},$$

donde A es una constante de normalización y g_i la degeneración del estado i .

Podemos evitarnos calcular dicha constante de normalización A si normalizamos a la población del estado fundamental,

$$\frac{n_i}{n_0} = \frac{g_i}{g_0} \frac{e^{-E_i/KT}}{e^{-E_0/KT}}.$$

La intensidad solo dependerá de la población del nivel desde el que se inicia la transición.

La degeneración tendrá la forma $g_J = 2J + 1$.

3.2. Estructura molecular

Recordemos que vamos a tratar con moléculas poliatómicas. En estos casos ya no nos es suficiente, para definir estructuras internas ni geometría, con menos de dos parámetros definir la 'forma' de la molécula. Es por ello, que ahora nos será necesario algo más puesto que no tendremos constantes rotacionales suficientes para calcular la geometría de equilibrio. Haremos uso de la sustitución isotópica, es decir, haremos uso de la misma molécula pero con alguno de sus átomos cambiado por un isótopo del mismo, ya que las especies isotópicas presentarán la misma geometría en el equilibrio pero mostrarán un espectro diferente, lo que nos permitía obtener las suficientes constantes rotacionales para describir lo que queremos.

Partimos de que disponemos del espectro de la molécula, pues lo hemos obtenido del programa. Sin embargo, con un único espectro de microondas no nos basta para obtener la geometría completa. En el caso de moléculas diatómicas o trompo-asimétricas pues esto nos sería suficiente puesto que con menos parámetros geométricos tendríamos todo definido.

Lo que podemos hacer es combinar diferentes espectros de moléculas isotópicas entre sí, donde supondremos que las distancias internucleares no varían significativamente de una a otra. A esto se le conoce como **estructura r_s** .

Por otro lado, podemos suponer, mediante la sustitución isotópica, que la posición del centro de masas de las moléculas son iguales para todas. En tal caso, tendremos la **estructura r_0** .

Notar, que la estructura r_s se encontrará comprendida entre las estructuras r_0 y la de equilibrio, r_e .

En nuestro caso dispondremos de una molécula con tres átomos, con ello podemos describir su momento de inercia respecto al centro de masas como;

$$I_{CM} = \sum_{i=1}^3 m_i d_i^2.$$

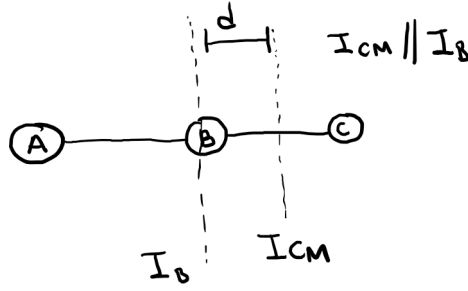


Figura 1: Esquema, a mano alzada, del teorema de Steiner.

Podemos escribir, finalmente, eludiendo los cálculos para ello, una expresión para nuestro centro de masas, en función de las distancias internucleares, que podremos utilizar para nuestro problema de sustitución isotópica.

$$I_{CM} = m_A R_{AB}^2 + m_C R_{BC}^2 - M \left(\frac{m_A R_{AB} - m_C R_{BC}}{M} \right)^2,$$

donde los R_{ab} son las distancias entre molécula a y b . M la masa total, y m_x la masa del átomo x .

Esto en cuanto a lo que se empleará en la estructura r_0 . En la estructura r_s nos será necesario disponer del mismo número de variedades isotópicas que de incógnitas tengamos ya que para cada par de isótopo dispondremos de una distancia al centro de masas de la molécula. Las distancias internucleares no variarán pero si lo harán los centros de masas de los distintas especies isotópicas.

$$|I' - I| = \mu d_i^2,$$

donde μ es la masa reducida de la variación isotópica $\frac{M \Delta m_i}{\Delta m_i + M}$.

4. Espectro en el infrarrojo, IR

Intentaremos ser breves en esta sección para no alargarnos mucho más y empezar con la presentación de los datos obtenidos.

En moléculas diatómicas podemos tener vibraciones en una sola dimensión, o nos estiramos o nos contraemos. Si tuviéramos vibraciones de flexión, como en las poliatómicas, nos aparecerían torques que nos provocarían rotaciones en la molécula., con lo que ya no estaríamos en un problemas de vibración.

Sin embargo, en moléculas de más de dos átomos, tenemos más vibraciones permitidas, $3N - 6$ grados de libertad. $3N - 5$ en el caso de ser lineal.

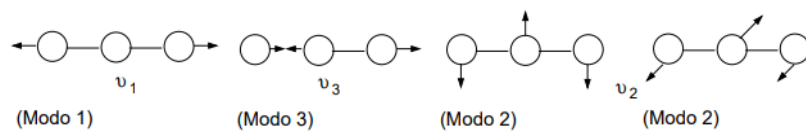


Figura 2: Diferentes modos de vibración para una molécula triatómica.

Para el tratamiento formal, matemático, de los modos de vibración de una molécula nos es necesario definir una coordenadas generalizadas con las cuales podamos definir los distintos modos de vibración del sistema, donde podremos definir la energía del sistema como;

$$T = A \sum_k^{3N} \left(\frac{dQ_k}{dt} \right)^2 \quad V = B \sum_k^{3N} \lambda_k Q_k^2,$$

donde el parámetro λ_k son las derivadas parciales segundas del potencial V respecto a cada una de las coordenadas generalizadas.

Aplicando el formalismo de Lagrange hallamos las ecuaciones de movimiento para el sistema. Cada una de las ecuaciones se encontrará desacoplada, si hacemos uso de las coordenadas normales, de las demás, con lo que bastará resolver cada una de las EDO,s por separado para obtener los modos de vibración.

$$\frac{d^2 Q_k}{dt^2} = -\lambda_k Q_k^2 \quad \forall k \in \{1, \dots, 3N\}.$$

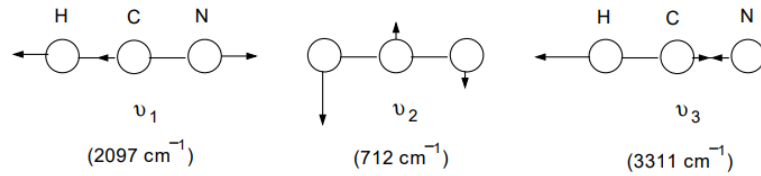


Figura 3: Modos normales de vibración para la molécula de HCN. El cianuro de hidrógeno será la molécula de la cuál se presentarán los datos, posteriormente.

5. Resultados y análisis en el rango de microondas

A continuación se mostraran y trataran los datos obtenidos en el espectro de las microondas para el cianuro de hidrógeno.

Molécula base		Primer isotopómero		Segundo isotopómero		Tercer isotopómero	
(1) <i>H</i> (12) <i>C</i> (14) <i>N</i>		(2) <i>H</i> (12) <i>C</i> (14) <i>N</i>		(1) <i>H</i> (12) <i>C</i> (15) <i>N</i>		(1) <i>H</i> (13) <i>C</i> (14) <i>N</i>	
Frec. (<i>MHz</i>)	Int.	Frec. (<i>MHz</i>)	Int.	Frec. (<i>MHz</i>)	Inte.	Frec. (<i>MHz</i>)	Int.
88651,75	1,00	72430,95	1,00	86067,51	1,00	83359,43	1,00
177303,45	3,00	144861,85	3,00	172134,97	3,00	172718,81	3,00
265955,18	4,80	217292,78	4,80	258202,46	4,80	259078,22	4,80
354606,86	6,40	289723,66	6,50	344269,90	6,40	345437,58	6,40
443258,55	7,80	362154,55	8,00	430337,35	7,80	431796,95	7,80
531910,12	8,90	434585,32	9,20	516404,68	8,90	518156,20	8,90
620561,90	9,60	507016,30	10,20	602472,22	9,70	604515,66	9,70
709213,58	10,10	579447,18	10,80	688539,66	10,20	690875,02	10,20
797865,26	10,20	651878,06	11,20	774607,10	10,30	777234,38	10,30
886517,02	10,00	724309,02	11,30	860674,62	10,20	863593,82	10,20
975168,73	9,60	796739,93	11,10	946742,09	9,80	949953,21	9,80
1063820,35	9,00	869170,75	10,70	1032809,47	9,30	1036312,51	9,20
1152472,14	8,30	941601,74	10,10	1118877,02	8,50	1122671,98	8,50
1241123,81	7,40	1014032,61	9,40	1204944,45	7,70	1209031,33	7,70
1329775,42	6,50	1086463,42	8,60	1291011,82	6,80	1295390,62	6,80
1418427,21	5,60	1158894,41	7,70	1377079,37	5,90	1381750,09	5,90
1507078,80	4,80	1231325,20	6,80	1463146,72	5,10	1468109,36	5,00
1595730,51	4,00	1303756,11	5,90	1549214,19	4,20	1554468,75	4,20
1684382,38	3,30	1376187,18	5,10	1635281,82	3,50	1640828,30	3,50
1773034,09	2,60	1448618,09	4,30	1721349,29	2,80	1727187,69	2,80

Cuadro 2: Datos obtenidos del espectro de microondas para la molécula de cianuro de hidrógeno. Se presentan la molécula base, y tres isotopómeros de la misma.

	Espaciado (<i>MHz</i>)	<i>B</i> (<i>MHz</i>)	<i>I</i> (<i>kg · m</i> ²) × 10 ⁻⁴⁰
Molécula base	88651,70	44325,85	18,93
1er isotopómero	72430,90	36215,45	23,17
2do isotopómero	86067,46	43033,73	19,50
3er isotopómero	86359,38	43179,69	19,44

Cuadro 3: Resultados del análisis del espectro de microondas del cianuro de hidrógeno. Se muestra el espaciado medio, la constante de rotación, *B*, y el momento de inercia.

5.1. Estructura r_s para el HCN

Moléculas	Posición (\AA)
(1) <i>H</i> (12) <i>C</i> (14) <i>N</i> & (1) <i>H</i> (12) <i>C</i> (14) <i>N</i>	$z_1 = \pm 1,622$
(1) <i>H</i> (12) <i>C</i> (14) <i>N</i> & (1) <i>H</i> (12) <i>C</i> (15) <i>N</i>	$z_3 = \pm 0,597$

Cuadro 4: Distancia, respecto al centro de masas, de cada uno de los átomos del HCN. z_1 corresponde a la distancia del hidrógeno con el CM, mientras que z_3 corresponde a la distancia entre el CM y el nitrógeno del extremo opuesto.

Veamos cuánto vale la distancia del carbono central al centro de masas, z_2 .

Átomo	Posición respecto <i>CM</i> (\AA)
<i>H</i>	$z_1 = -1,622$
<i>C</i>	$z_2 = -0,561$
<i>N</i>	$z_3 = +0,597$

Cuadro 5: Distancias respecto al centro de masas de cada uno de los átomos del HCN.

El valor de z_2 se ha calculado haciendo uso de la condición de que $\sum_k z_k m_k = 0$; $\forall k \in \{H, C, N\}$. Además, se toman $m_C = 12$, $m_H = 1$ y $m_N = 14$. Las distancias interatómicas serán por ende, $d_{a-b} = |z_a - z_b|$. Entonces;

Distancia entre átomos (\AA)
$d_{H-C} = 1,061$
$d_{C-N} = 1,158$

Cuadro 6: Distancias entre átomos.

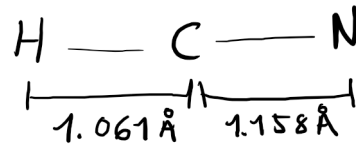


Figura 4: Esquema de las distancias interatómicas, mostradas en el cuadro 6.

5.2. Estructura r_0 para el HCN

Mostraremos los resultados en una tabla.

Moléculas utilizadas	Distancias entre átomos (\AA)
Base ; (2)H ; (15)N	$d_{H-C} = 1,062$; $d_{C-N} = 1,157$
Base ; (2)H ; (15)N ; (13)C	$d_{H-C} = 1,062$; $d_{C-N} = 1,157$
(2)H ; (15)N ; (13)C	$d_{H-C} = 1,062$; $d_{C-N} = 1,157$

Cuadro 7: En la columna **Moléculas utilizadas** se muestra de forma simplificada las especies utilizadas en cada caso. La primera fila se leería de la siguiente forma: Molécula base, especie isotópica en la que se sustituye solo el isótopo (2)H y especie isotópica donde se sustituye únicamente por el isótopo (15)N. Estaríamos utilizando la molécula base, (2)*H* (12)*C* (14)*N* y (1)*H* (12)*C* (15)*N*.

Como comentario final, observar que las distancias con la estructura r_0 tienen una discrepancia muy pequeña con las calculadas con la estructura r_s .

6. Resultados y análisis en el rango del infrarrojo

Procedemos a estudiar el espectro de vibración de la molécula HCN mediante espectroscopía IR. Ciertas longitudes de onda de la radiación infrarroja son absorbidas por la molécula y provocan que los enlaces vibren a frecuencias específicas. Estas vienen representadas en el espectro como picos de frecuencia que corresponden a vibraciones moleculares particulares (Figura 5). De acuerdo con lo estudiado (Cuadro 1), la molécula triatómica lineal de HCN consta de 4 modos normales de vibración.

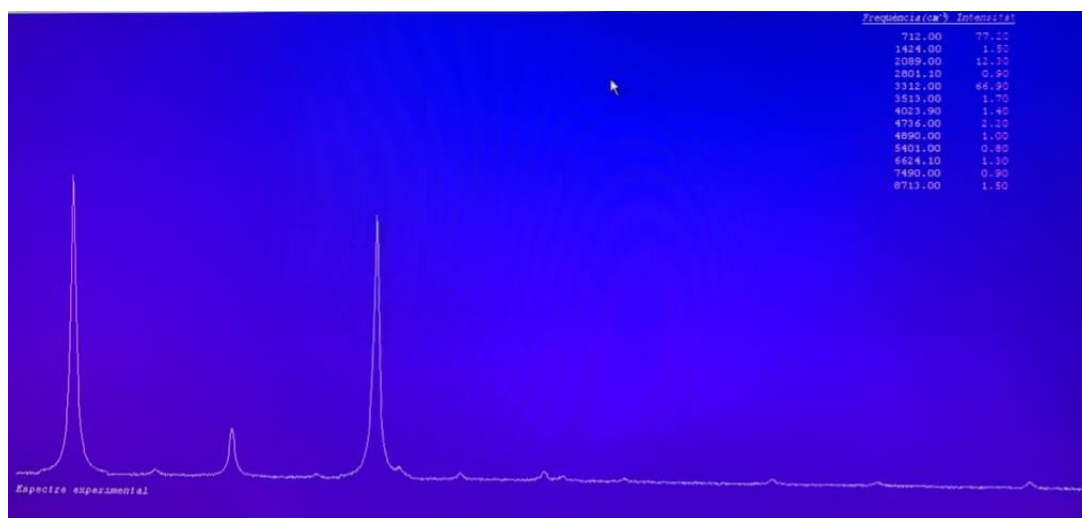


Figura 5: Espectro IR del HCN

Los picos de intensidad más altos se asocian a las frecuencias de tensión y flexión molecular (ν_1, ν_2 y ν_3) de la forma indicada en el Cuadro 8, y partiendo de que las frecuencias de tensión son mayores que la de flexión ($\nu_{tensión} > \nu_{flexión}$), y las frecuencias de movimientos simétricos menores que las de los asimétricos ($\nu_{sim.} > \nu_{asim.}$).

Frecuencia	Tipo de movimiento
ν_2	flexión
ν_1	tensión simétrica
ν_3	tensión asimétrica

Cuadro 8: Asociación de frecuencias de absorción fundamentales a los picos de intensidad del espectro IR de la molécula de HCN.

Estas frecuencias están asociadas a los modos normales de vibración del compuesto. Al tratarse de una molécula lineal, el HCN no cuenta con un movimiento de flexión asimétrica ya que se traduciría en una rotación. En su lugar tiene dos movimientos de flexión simétrica ν_2 de la misma frecuencia, uno en el eje X y otro en el eje Y. Las frecuencias fundamentales son linealmente independientes y el resto de picos de absorción de menor intensidad en el espectro son una combinación lineal de ellas. En el Cuadro 9 resumimos los datos del espectro del HCN.

Frecuencia / cm^{-1}	Intensidad	Combinación	Asignación
712.00	77.20	ν_2	$(0,0,0) \rightarrow (0,1,0)$
1424.00	1.50	$2\nu_2$	$(0,0,0) \rightarrow (0,2,0)$
2089.00	12.30	ν_1	$(0,0,0) \rightarrow (1,0,0)$
2801.10	0.90	$\nu_1 + \nu_2$	$(0,0,0) \rightarrow (1,1,0)$
3312.00	66.90	ν_3	$(0,0,0) \rightarrow (0,0,1)$
3513.00	1.70	$\nu_1 + 2\nu_2$	$(0,0,0) \rightarrow (1,2,0)$
4023.90	1.40	$\nu_3 + \nu_2$	$(0,0,0) \rightarrow (0,1,1)$
4736.00	2.20	$\nu_3 + 2\nu_2$	$(0,0,0) \rightarrow (0,2,1)$
4890.00	1.00	$2\nu_1 + \nu_2$	$(0,0,0) \rightarrow (2,1,0)$
5401.00	0.80	$\nu_3 + \nu_1$	$(0,0,0) \rightarrow (1,0,1)$
6624.10	1.30	$2\nu_3$	$(0,0,0) \rightarrow (0,0,2)$
7490.10	0.90	$\nu_3 + 2\nu_1$	$(0,0,0) \rightarrow (2,0,1)$
8713.00	1.50	$2\nu_3 + \nu_1$	$(0,0,0) \rightarrow (1,0,2)$

Cuadro 9: Tabla de frecuencias e intensidades experimentales del espectro IR de la molécula HCN

Podemos calcular también los modos normales de vibración de la molécula de forma teórica por el método de la matriz GF. Este teoría parte del enfoque teórico de Wilson, que permite expresar la energía potencial de una molécula en términos de coordenadas internas (distancias y ángulos de enlace), formando la matriz F; y la energía cinética en términos de parámetros estructurales mediante una matriz llamada G. La diagonalización de la matriz producto GF permite obtener las constantes de fuerza internas que, a su vez, permiten el cálculo de los modos normales de vibración.

El programa utilizado en la práctica calcula las constantes de fuerza a partir de las distancias entre átomos obtenidas en el apartado anterior, utilizando el método de la matriz GF.

$f_{XY} / N \cdot m^{-1}$	$f_{YZ} / N \cdot m^{-1}$	$f_{XZY} / N \cdot m^{-1}$
583	1788	21

Cuadro 10: Constantes de Fuerza internas de los enlaces en la molécula HCN en N/m obtenidas con el programa de la práctica. Los indicadores X, Y y Z hacen referencia a los átomos de la molécula H, C y N, respectivamente.

Como cabía esperar, observamos en el Cuadro 10 cómo la constante de fuerza del enlace triple entre el carbono y el nitrógeno es mayor que la del enlace simple entre el hidrógeno y el carbono.

Mediante estos cálculos el programa calcula también los modos normales de vibración teóricos para la molécula de HCN que se exponen en el Cuadro 11.

	Frecuencia experimental / cm^{-1}	Frecuencia calculada / cm^{-1}
Modo normal 1	2089.00	2089.06
Modo normal 2	712.00	707.49
Modo normal 3	712.00	707.49
Modo normal 4	3312.00	3312.10

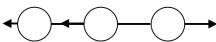
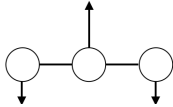
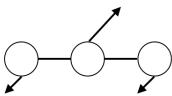

Cuadro 11: Tabla comparativa de los valores experimentales y los teóricos calculados por el programa de las frecuencias de los modos normales de vibración del HCN.

Las frecuencias teóricas de tensión se han obtenido con gran precisión, mientras que las de flexión presentan un error ligeramente mayor.

El programa también nos proporciona la matriz L de coordenadas cartesianas de los átomos en la molécula (Cuadro 12) con las que podemos crear un esquema del movimiento vibracional para cada modo normal de vibración de esta.

	x_1	y_1	z_1	x_2	y_2	z_2	x_3	y_3	z_3
Modo normal 1	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.37
Modo normal 2	-1.18	0.00	0.00	2.36	0.00	0.00	-1.18	0.00	0.00
Modo normal 3	0.00	-1.18	0.00	0.00	2.36	0.00	0.00	-1.18	0.00
Modo normal 4	0.00	0.00	-1.03	0.00	0.00	1.16	0.00	0.00	-0.13

Cuadro 12: Coordenadas cartesianas de los átomos de la molécula HCN para los modos normales de vibración según los cálculos del programa mediante el método de Wilson.

Vectores de desplazamiento	
<p>Modo normal 1</p> <p>(tensión simétrica)</p>	
<p>Modo normal 2</p> <p>(flexión simétrica eje X)</p>	
<p>Modo normal 3</p> <p>(flexión simétrica eje Y)</p>	
<p>Modo normal 4</p> <p>(tensión asimétrica)</p>	

Cuadro 13: Esquema de movimiento vibracional de la molécula según los resultados del Cuadro 12.

Observamos dichos esquemas en el Cuadro 13, donde apreciamos los tipos de modos de vibración estudiados para moléculas triatómicas como el HCN (Figuras 2 y 3).

6.1. Espectroscopía IR (moléculas angulares)

Por último, a modo comparativo, estudiamos el espectro en el infrarrojo del agua (H_2O), una molécula triatómica de geometría angular (Figura 6). Según lo estudiado en el Cuadro 1, esta molécula constará de 3 modos normales de vibración.

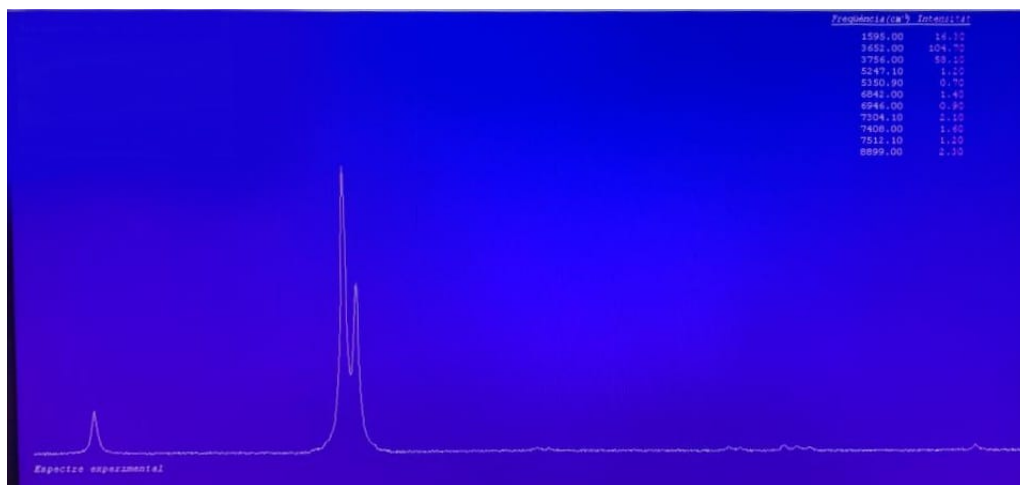


Figura 6: Espectro IR experimental del H_2O

Como hicimos en el apartado anterior, mostramos en el Cuadro 14 los datos experimentales del espectro IR proporcionados por el programa para la molécula de agua, y asignamos las frecuencias de los modos normales vibracionales a las intensidades más altas. En este caso, el agua solo tendrá un movimiento de flexión simétrica.

Frecuencia / cm^{-1}	Intensidad	Combinación	Asignación
1595.00	16.30	ν_2	$(0,0,0) \rightarrow (0,1,0)$
3652.00	104.70	ν_1	$(0,0,0) \rightarrow (1,0,0)$
3756.00	58.10	ν_3	$(0,0,0) \rightarrow (0,0,1)$
5247.10	1.20	$\nu_2 + \nu_1$	$(0,0,0) \rightarrow (1,1,0)$
5350.90	0.70	$\nu_2 + \nu_3$	$(0,0,0) \rightarrow (0,1,1)$
6842.00	1.40	$\nu_1 + 2\nu_2$	$(0,0,0) \rightarrow (1,2,0)$
6946.00	0.90	$\nu_3 + 2\nu_2$	$(0,0,0) \rightarrow (0,2,1)$
7304.10	2.10	$2\nu_1$	$(0,0,0) \rightarrow (2,0,0)$
7408.00	1.60	$\nu_1 + \nu_3$	$(0,0,0) \rightarrow (1,0,1)$
7512.10	1.20	$2\nu_3$	$(0,0,0) \rightarrow (0,0,2)$
8899.00	2.30	$2\nu_1 + \nu_2$	$(0,0,0) \rightarrow (2,1,0)$

Cuadro 14: Tabla de frecuencias e intensidades experimentales del espectro IR de la molécula H_2O

Para los cálculos teóricos con la matriz GF, aportamos el ángulo característico de la molécula:

$$\theta=104.5^\circ$$

Nuevamente, el programa calcula las constantes de fuerza de enlace (Cuadro 15) y las frecuencias de los modos normales asociadas, que comparamos con las experimentales en el Cuadro 16. Observamos cómo las frecuencias de tensión vuelven a calcularse con una precisión ligeramente mayor que la de flexión.

$f_{XY} / N \cdot m^{-1}$	$f_{YXY} / N \cdot m^{-1}$
769	69

Cuadro 15: Constantes de Fuerza internas de los enlaces en la molécula H_2O en N/m obtenidas con el programa de la práctica. Los indicadores X e Y hacen referencia a los átomos de la molécula H y O, respectivamente.

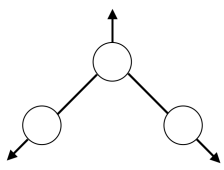
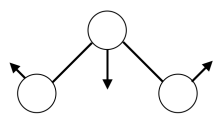
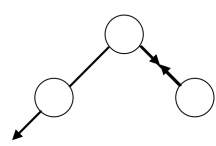
	Frecuencia experimental / cm^{-1}	Frecuencia calculada / cm^{-1}
Modo normal 1	3652.00	3659.87
Modo normal 2	1595.00	1636.99
Modo normal 3	3756.00	3712.99

Cuadro 16: Tabla comparativa de los valores experimentales y los teóricos calculados por el programa de las frecuencias de los modos normales de vibración del H_2O .

Por último, tomamos los valores que nos devuelve el programa y hacemos un esquema del movimiento de los modos normales de vibración de la molécula.(Cuadros 17 y 18)

	x_1	y_1	z_1	x_2	y_2	z_2	x_3	y_3	z_3
Modo normal 1	0.00	0.51	0.52	0.00	0.00	-1.05	0.00	-0.51	0.52
Modo normal 2	0.00	0.90	-1.15	0.00	0.00	2.29	0.00	-0.90	0.00
Modo normal 3	0.00	-0.65	0.00	0.00	1.31	0.00	0.00	-0.65	-1.15
Modo normal 4	0.00	-0.58	-0.45	0.00	1.16	0.00	0.00	-0.58	0.45

Cuadro 17: Coordenadas cartesianas de los átomos de la molécula H_2O para los modos normales de vibración según los cálculos del programa mediante el método de Wilson.

Vectores de desplazamiento	
<p>Modo normal 1 (tensión simétrica)</p>	
<p>Modo normal 2 (flexión simétrica)</p>	
<p>Modo normal 3 (tensión asimétrica)</p>	

Cuadro 18: Esquema de movimiento vibracional de la molécula según los resultados del Cuadro 17.

Referencias

- Requena, Alberto.(2020)ESPECTROSCOPIA ROTACIONAL DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.*Espectroscopía*:(Cap.8).García Maroto Editores.
- Requena, Alberto.(2020)ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.*Espectroscopía*:(Cap.9).García Maroto Editores.
- https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/22756/1/QCE_GradoQuimica_Apuntos_Tema14.pdf
- https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/23440/1/QCE_GradoQuimica_Apuntos_Tema12.pdf
- Apuntes de la asignatura *ESTRUCTURA DE LA MATERIA* del cuarto curso en el grado en física. Curso 2023-2024.