

1. Espectres de microones (MW), infraroig (IR) i Raman de molècules diatòmiques

1.1 Objectius

L'objectiu d'aquesta pràctica és analitzar els espectres de microones (MW), infraroig (IR) i Raman de molècules diatòmiques utilitzant els diferents models que s'expliquen en les classes de teoria. L'anàlisi feta permet obtenir tota la informació estructural possible sobre la molècula i comparar l'aplicabilitat dels models utilitzats per a obtenir aquesta informació.

1.2 Materials

- ✓ Presentació de Power Point: La presentació **P1** conté un breu repàs de la base teòrica necessària per a la realització d'aquesta pràctica.
- ✓ Programa de càlcul: El programa **Espectra**, executable en entorn Windows 2000 i següents, té una part que simula l'obtenció d'espectres experimentals de MW, IR i Raman de molècules diatòmiques, obté els espectres calculats segons els diferents models teòrics usats, permet la comparació entre espectres experimentals i calculats i, després de sol·licitar a l'alumne les dades necessàries per a l'anàlisi, calcula tota la informació estructural possible en cada tècnica espectroscòpica.
- ✓ Taules de dades.

1.3. Procediment

- ✓ Introdueix en l'ordinador el CD que se subministra amb el manual. Pots

seguir els passos següents directament sobre el CD o, si vols, copiar-ne el contingut en una carpeta del disc dur i treballar sobre aquesta.

- ✓ Repassa detalladament la presentació de Power Point **P1** per a recordar les explicacions teòriques necessàries (per a fer-ho has de tenir instal·lada aquesta aplicació en l'ordinador).
- ✓ Executa el programa **Espectra** introduint les dades necessàries a mesura que les sol·licite.
- ✓ Anota tota la informació subministrada i els càlculs realitzats pel programa en les taules que s'inclouen en els fulls de resultats.

1.4 Fulls de resultats

1.4.1 Tècnica espectroscòpica MW

Molècula:

<i>Taula 1.1. Dades de l'espectre de MW</i>		
<i>Freqüència (cm⁻¹)</i>	<i>Intensitat</i>	<i>Assignació</i>
		<i>J → J'</i>

<i>Taula 1.2. Resultats de l'anàlisi de l'espectre de MW</i>			
	B (cm^{-1})	D (cm^{-1})	r (Å)
<i>Rotor rígid</i>			
<i>Rotor no rígid</i>			

Discussió dels resultats obtinguts de l'espectre de MW:

1.4.2 Tècnica espectroscòpica IR

<i>Taula 1.3. Dades de l'espectre IR de vibració pura</i>		
<i>Freqüència (cm⁻¹)</i>	<i>Intensitat</i>	<i>Assignació</i>
		<i>v → v'</i>

<i>Taula 1.4. Resultats de l'anàlisi de l'espectre IR de vibració pura</i>		
	<i>v_c (cm⁻¹)</i>	<i>k (Dina cm⁻¹)</i>
<i>Oscil·lador harmònic</i>		
<i>Oscil·lador anharmònic</i>		

<i>Taula 1.5. Dades de l'espectre IR de rotació-vibració</i>			
<i>Freqüència (cm⁻¹)</i>	<i>Intensitat</i>	<i>Assignació</i>	
		<i>J → J'</i>	<i>v → v'</i>

Taula 1.5. Dades de l'espectre IR de rotació-vibració, continuació

Freqüència (cm^{-1})	Intensitat	Assignació	
		$J \rightarrow J'$	$v \rightarrow v'$

Taula 1.6. Resultats de l'anàlisi de l'espectre IR de rotació-vibració

$\nu_c (\text{cm}^{-1})$			$k (\text{Dina cm}^{-1})$		
$B_0 (\text{cm}^{-1})$	$B_1 (\text{cm}^{-1})$	$B_e (\text{cm}^{-1})$	$r_0 (\text{Å})$	$r_1 (\text{Å})$	$r_e (\text{Å})$

Discussió dels resultats obtinguts de l'espectre IR:

1.4.3 Tècnica espectroscòpica Raman

<i>Taula 1.7. Dades de l'espectre Raman</i>			
<i>Frequència (cm^{-1})</i>	<i>Intensitat</i>	<i>Assignació</i>	
		<i>$J \rightarrow J'$</i>	<i>$v \rightarrow v'$</i>

Taula 1.7. Dades de l'espectre Raman, continuació			
Freqüència (cm^{-1})	Intensitat	Assignació	
		$J \rightarrow J'$	$v \rightarrow v'$

Taula 1.8. Resultats de l'anàlisi de l'espectre Raman de rotació	
$B_0 (\text{cm}^{-1})$	$r_0 (\text{Å})$

Taula 1.9. Resultats de l'anàlisi de l'espectre Raman de rotació-vibració					
$\nu_c (\text{cm}^{-1})$			$k (\text{Dina cm}^{-1})$		
$B_0 (\text{cm}^{-1})$	$B_1 (\text{cm}^{-1})$	$B_e (\text{cm}^{-1})$	$r_0 (\text{Å})$	$r_1 (\text{Å})$	$r_e (\text{Å})$

Discussió dels resultats obtinguts de l'espectre Raman:

Comparació dels resultats obtinguts per mitjà de les diferents tècniques espectroscòpiques: