

2. Espectres de microones (MW) i infraroig (IR) de molècules poliatòmiques

2.1 Objectius

L'objectiu d'aquesta pràctica és analitzar els espectres de microones (MW) i infraroig (IR) d'algunes molècules triatòmiques utilitzant els diferents mètodes que s'expliquen en les classes de teoria. En el cas dels espectres de MW, l'anàlisi permet obtenir tota la informació estructural possible sobre la molècula i comparar l'aplicabilitat dels mètodes utilitzats per a obtenir aquesta informació; en el cas dels espectres d'IR, les freqüències fonamentals obtingudes dels espectres s'utilitza en el mètode de Wilson per a obtenir el camp de forces i els modes de vibració normals de la molècula.

2.2 Materials

- ✓ Presentació de Power Point: La presentació **P2** conté un breu repàs de la base teòrica necessària per a la realització d'aquesta pràctica.
- ✓ Programa de càlcul: En el cas dels espectres de MW, el programa **Espectra**, executable en entorn Windows 2000 i següents, té una part que simula l'obtenció d'espectres experimentals de diferents espècies isotòpicament substituïdes d'una mateixa molècula i, després de sol·licitar a l'alumne les dades necessàries per a l'anàlisi, obté els espectres calculats i utilitza els mètodes d'*estructura r_0* i *estructura r_s* per a l'obtenció de la geometria molecular. D'altra banda, el programa simula l'obtenció d'espectres experimentals d'IR de diferents molècules triatòmiques, tant lineals com angulars, i aplica les equacions corresponents del mètode de Wilson per a

obtenir el camp de forces. A més, proporciona la matriu de pas de coordenades cartesianes a coordenades normals i permet el dibuix dels modes normals de vibració de la molècula.

- ✓ Taules de dades.

2.3. 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 **P2** 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 vaja sol·licitant. Anota tota la informació subministrada i els càlculs fets pel programa en les taules que s'inclouen en els fulls de resultats.

2.4 Fulls de resultats

2.4.1 Tècnica espectroscòpica MW. Molècules triatòmiques lineals (ABC)

Molècula:

<i>Taula 2.1. Dades de l'espectre de MW</i>				
<i>Isòtops</i>		<i>Isòtops</i>		<i>Assignació</i>
<i>ν(MHz)</i>	<i>Int.</i>	<i>ν(MHz)</i>	<i>Int.</i>	
<i>ν(MHz)</i>	<i>Int.</i>	<i>ν(MHz)</i>	<i>Int.</i>	<i>J → J'</i>

<i>Taula 2.1. Dades de l'espectre de MW, continuació</i>								
ν (MHz)	<i>Int.</i>	ν (MHz)	<i>Int.</i>	ν (MHz)	<i>Int.</i>	ν (MHz)	<i>Int.</i>	$J \rightarrow J'$

<i>Taula 2.2. Resultats de l'anàlisi de l'espectre de MW</i>		
<i>Isòtops</i>	B (MHz)	I ($g\ cm^2$)

<i>Taula 2.3. Estructura r_0</i>		
<i>Isòtops</i>	r_{AB} (Å)	r_{BC} (Å)

<i>Taula 2.4. Estructura r_s</i>					
<i>Isòtops</i>	z_A (Å)	z_B (Å)	z_C (Å)	r_{AB} (Å)	r_{BC} (Å)

Discussió de resultats:

2.4.2 Tècnica espectroscòpica IR. Molècules triatòmiques lineals YXY o XYZ

Molècula:

Dibuix i numeració dels àtoms:

Taula 2.9. Dibuix de les vibracions normals en funció de les coordenades cartesianes de desplaçament

	<i>Vectors de desplaçament</i>
<i>Mode normal 1</i>	
<i>Mode normal 2</i>	
<i>Mode normal 3</i>	
<i>Mode normal 4</i>	

Discussió de resultats:

2.4.3 Tècnica espectroscòpica IR. Molècules triatòmiques angulars YXY

Molècula:

Dibuix i numeració dels àtoms:

Taula 2.10. Dades de l'espectre IR de vibració pura

<i>Freqüència (cm⁻¹)</i>	<i>Intensitat</i>	<i>Combinació</i>	<i>Assignació</i>

Taula 2.11. Resultats de la aplicació del mètode de Wilson

<i>k₁₂ (dina cm⁻¹)</i>	<i>k₁₂₃ (dina cm⁻¹)</i>

Taula 2.12. Freqüències fonamentals experimentals i calculades

<i>Freqüències fonamentals</i>	<i>v_{exp} (cm⁻¹)</i>	<i>v_{cal} (cm⁻¹)</i>
<i>Mode normal 1</i>		
<i>Mode normal 2</i>		
<i>Mode normal 3</i>		

Taula 2.13. Matriu L de transformació de coordenades normals a coordenades cartesianes de desplaçament

<i>Matriu L</i>	x_1	y_1	z_1	x_2	y_2	z_2	x_3	y_3	z_3
<i>Mode normal 1</i>									
<i>Mode normal 2</i>									
<i>Mode normal 3</i>									

Taula 2.14. Dibuix de les vibracions normals en funció de les coordenades cartesianes de desplaçament

	<i>Vectors de desplaçament</i>
<i>Mode normal 1</i>	
<i>Mode normal 2</i>	
<i>Mode normal 3</i>	

Discussió de resultats: