

## Tarea 8.

1. Discutir la configuración electrónica y la estructura del enlace de la molécula  $NO$ . Comparar con la molécula  $N_2$ . ¿Cuál de las dos moléculas es más estable?
2. Escribir las configuraciones electrónicas de las siguientes moléculas diatómicas heteronucleares: (a)  $LiH$ , (b)  $CN$ , (c)  $SO$ , (d)  $ClF$ , (e)  $HI$ . Determinar si las moléculas son polares y en caso afirmativo identificar cuál extremo de la molécula es positivo y cuál es negativo.
3. Demostrar que la razón del número de moléculas diatómicas en un estado rotacional excitado  $J$  al número de moléculas en el estado rotacional base  $J = 0$  en un gas a temperatura  $T$  está dado por

$$\frac{N_J}{N_0} = (2J + 1) \exp \left[ -\frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2\mu R_e^2 k_B T} \right]$$

donde  $\mu$  es la masa reducida,  $R_e$  es la distancia de equilibrio y  $k_B$  es la constante de Boltzmann. ¿Para qué valor de  $J$  se tiene el máximo de población? Hacer una gráfica de esta expresión para  $H^{35}Cl$  a temperatura ambiente (300 K) en función de  $J$ .

4. Demostrar que la función de onda

$$\psi = N \left( \phi_s + \alpha \phi_{p_x} + \beta \phi_{p_y} + \gamma \phi_{p_z} \right)$$

tiene su máximo en la dirección del vector  $\vec{a} = \alpha \hat{i} + \beta \hat{j} + \gamma \hat{k}$  y su mínimo en la dirección opuesta. En consecuencia el ángulo entre los máximos de dos funciones de onda híbridas correspondientes a los vectores  $\vec{a}$  y  $\vec{b}$  es igual al ángulo entre esos vectores. Escribir el vector  $\vec{a}$  para cada una de las funciones híbridas  $sp^3$ :

$$\psi_1 = N \left( \phi_s + \phi_{p_x} + \phi_{p_y} + \phi_{p_z} \right)$$

$$\psi_2 = N \left( \phi_s + \phi_{p_x} - \phi_{p_y} - \phi_{p_z} \right)$$

$$\psi_3 = N \left( \phi_s - \phi_{p_x} + \phi_{p_y} - \phi_{p_z} \right)$$

$$\psi_4 = N \left( \phi_s - \phi_{p_x} - \phi_{p_y} + \phi_{p_z} \right)$$

Demostrar que estos vectores apuntan en dirección de los vértices de un tetraedro regular formando entre sí ángulos de  $109^\circ 28'$