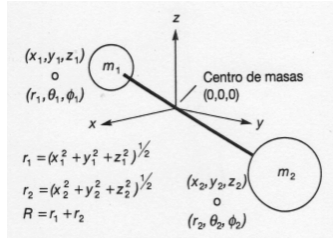


El rotor rígido de dos partículas

El rotor rígido consiste en dos partículas de masas m_1 y m_2 que giran alrededor del centro de masas del sistema, manteniendo la distancia R constante. Es un modelo para el estudio de la rotación de una molécula diatómica.



Según vimos en la lección 4:

$$T = \frac{\ell^2}{2I}$$

donde ℓ^2 es el cuadrado del momento angular clásico e I es el momento de inercia.

A partir de aquí podemos construir el Hamiltoniano para el rotor rígido ya que al mantenerse la distancia constante (R) la energía potencial es constante y podemos suponer que es el cero de energías:

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

Es decir, que es el operador asociado al cuadrado del momento angular por una constante. Las funciones propias del Hamiltoniano serán los armónicos esféricos sin más que sustituir para este problema los números cuánticos ℓ y m por J y M , respectivamente. Entonces, las funciones propias serán:

$$Y_J^M(\theta, \phi) = (-1)^M \left[\frac{(2J+1)(J-|M|)!}{4\pi(J+|M|)!} \right] \cdot P_J^{|M|}(\cos\theta) e^{iM\phi}$$

donde $J = 0, 1, 2, 3, \dots$ y $M = -J, -J+1, \dots, 0, \dots, +J-1, +J$ siendo $2J+1$ valores posibles de M para cada J lo que indica que los niveles de energía del rotor rígido están degenerados. Los valores propios son:

$$E_J = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I} = BJ(J+1), \quad J = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Espectro de rotación

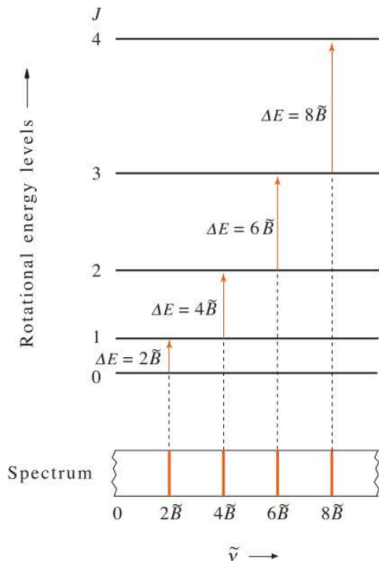
Donde $B = \hbar^2/2I$ es la llamada **constante rotacional** de la molécula y \tilde{B} es B/c o B en cm^{-1} . El espectro de rotación de la figura puede obtenerse haciendo:

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{J+1} - E_J \\ &= \frac{\hbar^2}{2I} [(J+1)(J+2) - J(J+1)] \\ &= \frac{\hbar^2}{I} (J+1) \\ &= 2\tilde{B}(J+1)\end{aligned}$$

donde se ha tenido en cuenta que la **regla de selección** es $\Delta J = \pm 1$, de este espectro se puede obtener directamente \tilde{B} o el momento de inercia de la molécula I y de él teniendo en cuenta que:

$$I = \mu R^2$$

podemos obtener experimentalmente distancias intermoleculares (R) conocida la masa reducida de la diatómica.



Espectro de rotación del HCl

