

Transición del carácter local y normal en los modos de vibración de moléculas triatómicas

Marisol Bermúdez-Montaña
Facultad de Química
Universidad Nacional Autónoma de México

El uso del esquema normal en el estudio de los modos vibracionales en moléculas ha jugado un rol fundamental en el desarrollo de modelos teóricos, sin embargo, cuando la molécula involucra átomos con diferencias de masas grandes, el esquema local ofrece una descripción mucho más completa. El uso del concepto de poliada adquiere mayor importancia cuando se usan modelos locales para estudiar moléculas normales ya que es necesario tener en cuenta términos que no preservan dicha poliada. Usando un modelo de dos osciladores de Morse paramétrico en términos de las constantes de fuerza y estructura se detecta la transición entre los modos locales a normales a través de herramientas cuánticas y semiclásicas. Se evalúa la validez de este modelo algebraico a través de la simulación del espectro Raman para el CO_2 .

