

Física para Ciências Biológicas - 2017

Lista de Exercícios 5 B - Casa

Data: Junho 2017

Todas as figuras encontram-se no final desta lista

- Na Figura 1 são apresentados espectros de níveis eletrônicos ocupados das moléculas metanol (CH_3OH) e eteno (C_2H_4), em eV .
 - Quantos elétrons de valência tem a molécula de eteno? E a molécula de metanol? Estão representados níveis de caroço? Identifique-os.
 - Explique o que significa serem as energias negativas.
 - A partir desses espectros qual seria o potencial de ionização para estas moléculas?
 - Qual o tipo de hibridização dos orbitais do átomo de carbono no eteno?
 - Para o eteno, temos visualizações de dois orbitais moleculares na figura 2(I e II). Qual deles tem energia mais baixa? Justifique.
- A frequência de vibração em uma determinada molécula é $0.42 \times 10^{13} Hz$.
 - Calcule a energia de ponto zero e explique o significado;
 - Calcule a energia absorvida na transição $n=0$ para $n=1$;
 - A energia para transição entre estados mais altos é a mesma?
- A constante de força k entre os átomos na molécula de CO é de $1960 N/m$.
 - Determine a massa reduzida dessa molécula.
 - Calcule o quantum de energia vibracional.
 - Em que região de energias está a absorção capaz de fazer a molécula passar do primeiro para o segundo estado vibracional? (micro-ondas, infra-vermelho, visível, ultra-violeta,...)
Dados: As massas dos átomos podem ser dadas em u.m.a. (unidades de massa atômica), que equivale à massa m_p de um próton ou m_n de um nêutron. Neste caso $m(C) = 12$ u.m.a., $m(O) = 16$ u.m.a..
- A distância de equilíbrio entre os núcleos de uma molécula de CO é de $0,112 nm$, assim seu momento de inércia I é de $1,14 \times 10^{-46} Kg.m^2$.
 - Determine as energias de transição entre os primeiros três níveis rotacionais da molécula ($0 \rightarrow 1$ e $1 \rightarrow 2$).
 - Compare com as energias da questão anterior. Em que região de energias está essa absorção? (micro-ondas, infra-vermelho, visível, ultra-violeta,...)
- Uma molécula pode vibrar de várias maneiras diferentes, mas sabemos que podemos reproduzir qualquer dessas maneiras em termos de algumas vibrações fundamentais, ou modos de vibração “normais”. Na figura 3 estão indicados, para as moléculas de água e metano, tipos de vibração e listadas as energias aproximadas (em eV) e as intensidades relativas de acoplamento com a luz (I) correspondentes.

- (a) Use o conceito de dipolo elétrico molecular para explicar as variações de intensidade de absorção de luz da tabela.
- (b) Comente o fato de o estiramento simétrico acoplar com a luz para a água, mas não para o metano.
- (c) A 0 K qual seria a energia das moléculas de H_2O e CH_4 ?
- (d) Usando os dados da tabela, chegue ao comprimento de onda e frequência de um fóton que possa fazer a molécula de água passar do primeiro para o segundo estado vibracional. Em que região de energias está essa absorção? (micro-ondas, infra-vermelho, visível, ultra-violeta,...)

Formulário:

$$\begin{array}{lll}
 \vec{F} = m\vec{a} & \vec{P} = m\vec{v} & \\
 v_x = \frac{dx}{dt} & a_x = \frac{dv_x}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2} & \\
 v = \omega R = \frac{d\theta}{dt}R & \frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2x & \omega = \sqrt{k/m} \\
 x(t) = A \cos(\omega t + \phi) + B & x(t) = A \sin(\omega t + \phi) + B & \\
 \frac{df(g(x))}{dx} = \frac{df}{dg} \frac{dg}{dx} & \frac{d}{dx} \alpha x^n = \alpha n x^{n-1} & \\
 \frac{d}{dx} \sin(ax + b) = a \cos(ax + b) & \frac{d}{dx} \cos(ax + b) = -a \sin(ax + b) & \\
 \vec{F}_G = \frac{GMm}{r^2} \hat{e} & \vec{F}_E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Qq}{r^2} \hat{e} & \vec{p} = q\vec{d} \\
 \vec{F}_E = q\vec{E} & \vec{E} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{p}}{r^3} & \Phi_{(\text{sup})} = \frac{Q_{(\text{int})}}{\epsilon_0} \\
 W = \int \vec{F} \cdot d\vec{r} & W = \Delta K & W = -\Delta U \\
 K = \frac{1}{2}mv^2 & U_g = mgh & U_x = \frac{1}{2}kx^2 \\
 E_T = K + U & V = Ed & E = \frac{\sigma}{\epsilon} \\
 C = \frac{Q}{V} & E = pc & E = hf \\
 E_{\text{tot}} = W + E_{\text{el}} & p = h/\lambda & \Delta x \Delta p_x \geq \hbar \\
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) & & P(x) = |\psi(x)|^2 \\
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) & & P(a-b) = \int_a^b P(x) dx \\
 E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 & E_n = (n + \frac{1}{2})hf = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega & E_n = \frac{(Ze)^2}{a_0 8\pi\epsilon_0} \frac{1}{n^2} \\
 E = \frac{\hbar^2}{I} r & &
 \end{array}$$

Constantes Físicas Seleccionadas

$$\begin{array}{lll}
 G = 6,67 \times 10^{-11} Nm^2/kg^2 & \epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} C^2/Nm^2 & 1/(4\pi\epsilon_0) \approx 9 \times 10^9 Nm^2/C^2 \\
 m_e = 9,109 \times 10^{-31} kg & e = 1,6 \times 10^{-19} C & m_n = 1,675 \times 10^{-27} kg \\
 c = 2,998 \times 10^8 m/s & h = 6,626 \times 10^{-34} J.s = 4,136 \times 10^{-15} eV.s & \\
 a_0 \approx 5,29 \times 10^{-11} m & &
 \end{array}$$

Unidades

$1ml = 1cm^3$	$1min = 60s$	$1cm/s = 0,036km/h$
Newton $1N = 1kg.m/s^2$	Joule $1J = 1N.m$	Watt $1W = 1J/s$
Volt $1V = 1J/C$	Farad $1F = 1C/V$	Debye (não SI) $1D \simeq 3,33 \cdot 10^{-30} C.m$
$1eV = 1,6 \times 10^{-19} J$	$1J = 0,624 \times 10^{19} eV$	$1cm^{-1} = 1,97 \times 10^{-5} eV$
$1nX = 10^{-9} X$	$1\mu X = 10^{-6} X$	$1mX = 10^{-3} X$
$1KX = 10^3 X$	$1MX = 10^6 X$	$1GX = 10^9 X, \forall X$

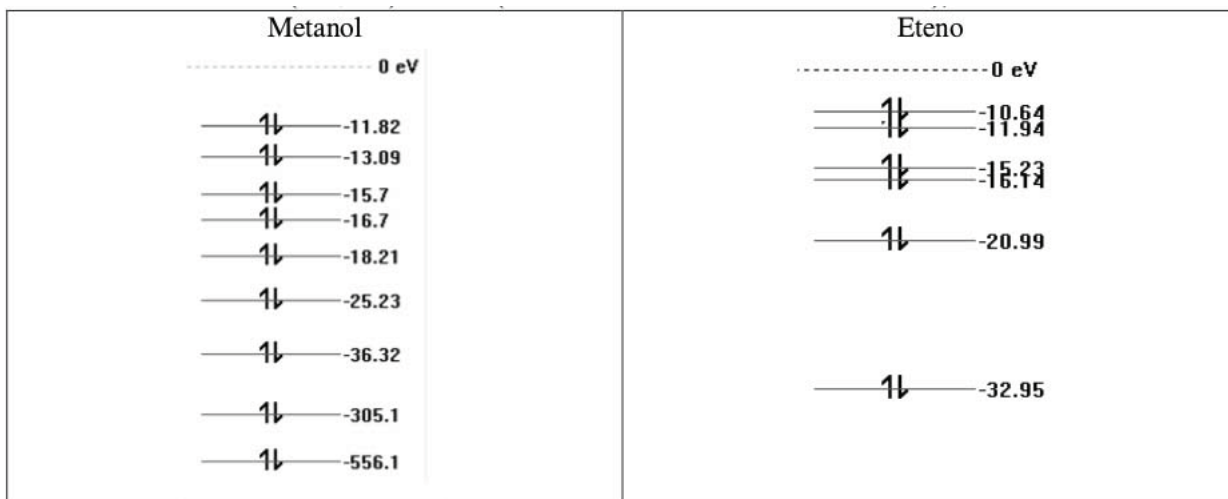


Figura 1: Espectros de níveis eletrônicos ocupados das moléculas metanol (CH_3OH) e eteno (C_2H_2), em eV .

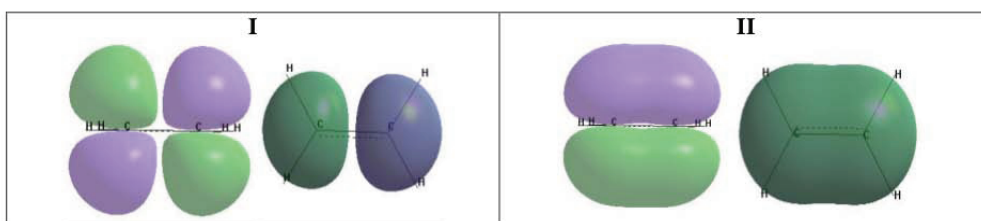


Figura 2: Dois orbitais moleculares do eteno.

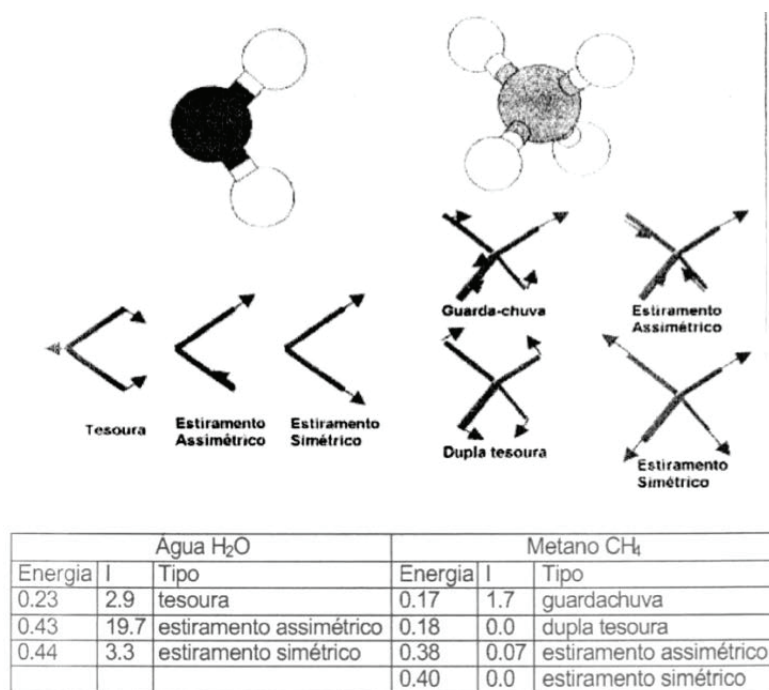


Figura 3: Representação dos modos normais para as moléculas de água e metano (as setas representam esquematicamente o movimento colaborativo dos átomos), e tabela de energias (em eV) de primeira transição para cada modo.