

4300315 – Introdução à Física Atômica e Molecular - Prova P3 - 1s/2015

$$c = 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}; \hbar = 1.0546 \times 10^{-27} \text{ cm}^2 \text{ g/s}$$

$$k_B = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/K}; \bar{k}_B = 0.6939 \approx 0.7 \text{ cm}^{-1}/\text{K}$$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}; N_A = 6 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$\bar{f} = f/c; \bar{E} = E/(2\pi c\hbar)$$

$$E(J) = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} J(J+1) = BJ(J+1)$$

$$\frac{N(E_J)}{N(E_0)} = (2J+1)e^{-BJ(J+1)/k_B T}$$

$$E_\nu = \hbar\omega_{\text{vib}} \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \left[1 - \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \chi_e\right]$$

$$\Delta E(\nu) = \hbar\omega_{\text{vib}} [1 - 2(\nu + 1)\chi_e]$$

$$D_0 \approx \frac{1}{2}\nu_{\text{max}} \cdot \hbar\omega_{\text{vib}} (1 - 2\chi_e)$$

$$D_e = D_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega_{\text{vib}}$$

Q1 - O espectro vibracional da molécula de HCl mostra as seguintes transições (em cm^{-1}):

$\nu_i \leftrightarrow \nu_f$	0-1	1-2	2-3
$\Delta\nu_{\text{obs}} / \text{cm}^{-1}$	2885.9	2782.1	2679

Com base nestes dados e usando a aproximação do potencial de Morse, determine:

- [1.0] A constante de anarmonicidade da molécula.
- [1.0] O número máximo de estados ligados.
- [1.0] A frequência do espectro vibracional (em cm^{-1}).
- [1.0] A energia de dissociação (em cm^{-1}).

Q2 - Considere uma molécula diatômica X_2 de um elemento X desconhecido. Sabe-se que o comprimento de ligação da molécula é $R_e \approx 1 \text{ \AA}$. O espectro rotacional mostra uma separação de linhas com valor de 4 cm^{-1} . Utilizando a aproximação de rotor rígido, determine:

- [1.0] A energia dos três primeiros níveis rotacionais da molécula (em cm^{-1}).
- [1.0] A massa molar do elemento X .
- [1.0] O nível rotacional mais populado a $T=300 \text{ K}$.

Justifique todas as respostas.

Q3 - A figura abaixo mostra o espectro rovibracional da molécula de HCl (o eixo horizontal está em unidades de cm^{-1}). Com base no gráfico:

- (a) [1.0] Estime a frequência da transição vibracional (em cm^{-1}). Compare com os dados da questão 1 e identifique a transição vibracional. *Justifique* o seu procedimento.
- (b) [1.0] Estime o valor da constante do espectro rotacional \bar{B} do HCl (em cm^{-1}). *Justifique* o seu procedimento.
- (c) [1.0] Estime o comprimento de ligação da molécula de HCl em Å . Massas molares: $M_H = 1 \text{ g/mol}$ e $M_{Cl} = 35 \text{ g/mol}$.

