

QFL 0606 – Fundamentos da Química para Física
5ª Lista de Exercícios – 04.06.18

1. Com base na teoria de orbitais moleculares desenvolvida em aula, qual é sua previsão para a existência ou não da molécula C_2 ? Justifique.
2. Com base na teoria de orbitais moleculares desenvolvida em aula, o que se deve esperar para a ordem relativa dos comprimentos de ligação e das energias de ligação do O_2^+ , O_2 , O_2^- , e O_2^{2-} ?
3. Com base na teoria de orbitais moleculares desenvolvida em aula, discuta a ligação na molécula de CO.
4. Com base na teoria de orbitais moleculares desenvolvida em aula, qual deve ser a ordem de estabilidade relativa entre N_2 , N_2^+ e N_2^- ?
5. Para a molécula de CO à temperatura de 300 K, determine a população dos primeiros três estados rotacionais; idem para os estados vibracionais. Para quais estados corresponde a transição rotacional mais intensa? Como esses resultados se alteram para 1000 K?
6. Esboce uma justificativa matemática para o fato de que uma molécula precisa ter um momento dipolar permanente para que possam ocorrer transições rotacionais. Expresse esse problema de forma mais rigorosa deduzindo a regra de seleção para esse tipo de transição.
7. Três linhas consecutivas no espectro rotacional do $H^{79}Br$ são observadas em 84,544, 101,355 e 118,112 cm^{-1} . Atribua as linhas às transições ($J'' \rightarrow J'$) apropriadas e determine os valores de B, D e da distância internuclear.
8. No espectro de rotação puro do gás $H^{35}Cl$, observa-se que as linhas em 106,0 cm^{-1} e 233,2 cm^{-1} têm intensidades iguais. Qual é a temperatura do gás? $B = 10,6 cm^{-1}$, $k_B = 0,695 cm^{-1} K$
9. A frequência mais baixa de absorção de um espectro rotacional puro do $^{12}C^{32}S$ ocorre em 48991,0 MHz. Determine a distância de ligação no $^{12}C^{32}S$.
10. Ache J_{max} para a molécula de $H^{35}Cl$ a 300 K e a 1000 K. $B_e = 10,59 cm^{-1}$ e $k_B = 0,695 cm^{-1} K$
11. Qual é a diferença entre frequência harmônica e frequência fundamental? Qual é a relação quantitativa entre elas?
12. Que interações físicas determinam o valor da constante de força de uma molécula?
13. Como a substituição isotópica afeta a constante de força, a frequência vibracional e a energia do ponto zero de um sistema descrito por um oscilador harmônico? Ilustre numericamente seus dados para o caso do sistema HCl / DCl.
14. Qual é a regra de seleção para transições vibracionais? Qual das transições deve ser mais intensa: $1 \leftarrow 0$ ou $2 \leftarrow 0$?
15. Conhecida a frequência harmônica ($\omega_e = 2.886 cm^{-1}$) do $^1H^{35}Cl$, determine a frequência correspondente para a espécie $^2D^{35}Cl$. Qual dessas moléculas tem a maior distância internuclear de equilíbrio? E a maior constante de força?
16. Esboce, de forma comparativa, as curvas de energia potencial (energia versus distância internuclear) para as moléculas $H^{19}F$ ($\omega_e = 4138 cm^{-1}$, $D_0 = 566 kJ/mol$) e $H^{39}Br$ ($\omega_e = 2649 cm^{-1}$, $D_0 = 363 kJ/mol$). Destaque nelas os níveis (espaçamentos vibracionais).