

PSI5005 Fotônica e Eletrônica Molecular

Quarta lista de exercícios

1.- Modelo Semi- clássico:

No problema de transferência de elétrons, mostrar que os potenciais adiabáticos se repelem no ponto de degenerescência quando a interação entre o estado reagente e produto é diferente de zero. Este tipo de processos é denominado de adiabático.

2.- Modelo Quântico

No problema de transferência de elétrons em um sistema de dois níveis, mostrar que a taxa de transferência pode ser expressa pela seguinte equação:

$$\hbar k = \frac{2\lambda^2\alpha^2}{2\alpha^2 + \lambda^2 + \eta^2}$$

Onde :

$$\alpha = H_{DA} = H_{AD}$$
$$\eta = H_{AA} - H_{DD}$$

Mostra o gráfico de $\hbar k / \alpha$ em função de λ / α para diferentes valores de: $0 \leq \frac{\eta}{\alpha} \leq 1$