

5930647 – Físico-Química IV
Lista 4 - Espectroscopia rotacional

1. Discuta as origens físicas das regras gerais de seleção para espectroscopias de micro-ondas e de infravermelho.
2. Quais entre as seguintes moléculas, podem ter espectro de absorção de rotação pura na região de micro-ondas? E espectro de Raman rotação pura? (a) H_2 (b) HCl (c) CH_4 (d) CH_3Cl .
3. Calcule o momento de inércia do SiH_4 (comprimento de ligação 147,98 pm). De quanto varia o momento de inércia quando substituímos o ^1H pelo ^2H ?
4. Calcule a frequência da transição $J = 3 \leftarrow 2$ no espectro de rotação pura do $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. O comprimento de ligação no equilíbrio é 112,81pm.
5. Se o número de onda da transição rotacional $J = 3 \leftarrow 2$ do $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$, considerado um rotor rígido, for $63,56 \text{ cm}^{-1}$, qual é (a) o momento de inércia da molécula, (b) o comprimento da ligação?
6. Determine os comprimentos das ligações CO e CS no OCS a partir das constantes de rotação $B(^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}) = 6081,5 \text{ MHz}$, $B(^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}) = 5932,8 \text{ MHz}$.
7. O número de onda da radiação incidente num espectrômetro Raman é 20487 cm^{-1} . Qual o número de onda da radiação Stokes espalhada na transição $J = 2 \leftarrow 0$ do $^{14}\text{N}_2$? O comprimento de ligação no equilíbrio 109,76 pm.
8. Calcule a constante de distorção centrífuga para o $^1\text{H}^{127}\text{I}$, para o qual $\tilde{B} = 6,511 \text{ cm}^{-1}$ e $\tilde{v} = 2308 \text{ cm}^{-1}$. Por qual fator a constante se alteraria se o ^1H fosse substituído pelo ^2H ?
9. Qual é o nível rotacional mais populado do Br_2 a (a) 25° C , (b) 100° C ? Considere $\tilde{B} = 0,0809 \text{ cm}^{-1}$.