

5930647 – Físico-Química IV
Lista 5 - Espectroscopia vibracional

1. Considere uma molécula diatômica que é muito suscetível à distorção centrífuga no seu estado vibracional fundamental. Você espera que a excitação para níveis de rotação mais altos altere o comprimento de ligação de equilíbrio desta molécula?
2. Como os espectros de rotação e vibração das moléculas podem ser alterados pela substituição isotópica?
3. Calcule a diferença percentual entre os número de onda das vibrações fundamentais do $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ e $^2\text{H}^{37}\text{Cl}$ na hipótese de as respectivas constantes de força serem iguais. Use $m(^1\text{H}) = 1,0078 \text{ u}$, $m(^2\text{H}) = 2,0140 \text{ u}$, $m(^{35}\text{Cl}) = 34,9688 \text{ u}$, $m(^{37}\text{Cl}) = 36,9651 \text{ u}$.
4. Calcule os números relativos de moléculas de Br_2 ($\tilde{\nu} = 321 \text{ cm}^{-1}$) no segundo estado excitado de vibração e no primeiro estado excitado a (a) 298 K, (b) 800 K.
5. Para a molécula $^{14}\text{N}_2$, os valores de $\Delta\tilde{G}$ das transições $\tilde{\nu} = 1 \leftarrow 0$, $2 \leftarrow 0$ e $3 \leftarrow 0$ são respectivamente, 2345,15, 4661,40 e 6983,73 cm^{-1} . Calcule $\tilde{\nu}$ e x_e . Admita que y_e seja nulo.
6. A constante de força da molécula de $^{79}\text{Br}^{79}\text{Br}$ é 240 N.m^{-1} . Calcule a frequência vibracional fundamental e a energia de ponto zero da molécula $^{79}\text{Br}_2$. $m(^{79}\text{Br}) = 78,92 \text{ u}$.
7. Dado que $B = 58000 \text{ MHz}$ e $\tilde{\nu} = 2160,0 \text{ cm}^{-1}$ da molécula CO, calcule as frequências das primeiras linhas dos ramos R e P no espectro de rotação vibracional de CO.
8. A linha fundamental no espectro de infravermelho da molécula de $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ ocorre em 2143,0 cm^{-1} e o primeiro harmônico ocorre em 4260,0 cm^{-1} . Calcule o valor de $\tilde{\nu}_e$ e $x_e\tilde{\nu}_e$ para molécula de $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$.
9. Os seguintes dados são obtidos para o espectro de rotação de vibração de $^1\text{H}^{79}\text{Br}$. Determine $\tilde{B}_0$, $\tilde{B}_1$, $\tilde{B}_e$ e α_e através desses dados.

Linha	Frequência/ cm^{-1}
R(0)	2642,60
R(1)	2658,36
P(1)	2609,67
P(2)	2592,51