

QFL 1242 – Físico-Química II
4ª Lista de Exercícios – 27.09.18

31. Para uma partícula movendo-se na direção x de $-\infty$ para $+\infty$ com uma energia $E < V_0$:

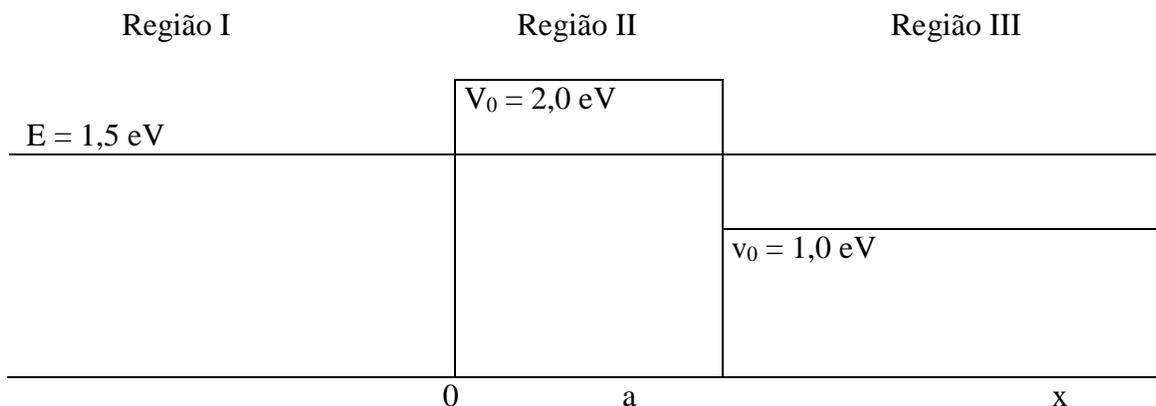
Parte A.

Apresente uma discussão qualitativa em função dos resultados discutidos em classe para as questões abaixo:

- Qual é a previsão feita pela mecânica quântica para o comportamento dessa partícula perante a barreira de energia potencial esquematizada abaixo?
- O que se pode dizer da "velocidade" da partícula nas regiões I e III?
- Como a massa da partícula e a altura da barreira afetam esse comportamento?

Parte B

Para o caso visto em aula, que corresponde a $v_0 = 0$, faça uma estimativa do coeficiente de transmissão para o caso da partícula ser um elétron. Idem para o próton.



32. 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.

33. Esboce uma justificativa matemática para o fato de que uma molécula diatômica precisa ter um momento dipolar variando com a distância internuclear para que possam ocorrer transições vibracionais. Expresse esse problema de forma mais rigorosa deduzindo a regra de seleção para esse tipo de transição.

34. Para a molécula de CO à temperatura de 300 K, determine a população dos dois primeiros estados vibracionais. Como esses resultados são afetados se a temperatura for alterada para 2000 K? $\omega_e = 2170 \text{ cm}^{-1}$.

35. Ache a fração de moléculas de H^{35}Cl vibracionalmente excitadas a 300 K e a 1000 K. $\omega_e = 2990 \text{ cm}^{-1}$.

36. Compare a energia cinética média de uma molécula de CO com a energia necessária para a transição vibracional $1 \leftarrow 0$ à temperatura ambiente. E para uma transição rotacional?
37. Obtenha $\partial/\partial z$ em coordenadas esféricas polares.
38. Obtenha L_z em coordenadas esféricas polares.
39. Mostre que $[L_x, L_y] = i \hbar L_z$. Qual é a implicação física desse resultado?
40. Mostre que Y_1^0 e Y_0^0 são ortogonais. Idem para Y_1^1 e Y_1^{-1} .
41. Verifique que $Y_l^m(\theta, \varphi)$ é autofunção do operador L_z .
42. Para a molécula de CO à temperatura de 300 K, determine a população dos primeiros três estados rotacionais. Para quais estados corresponde a transição rotacional mais intensa? Como esses resultados serão afetados se a temperatura for alterada para 1000 K?
43. 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.
44. 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? $B = 10,6 cm^{-1}$, $k_B = 0,695 cm^{-1} K^{-1}$.
45. 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 $^{12}C^{32}S$.
46. Obtenha a expressão para J_{max} mostrada em sala e calcule J_{max} para a molécula de $H^{35}Cl$ a 300 K e a 1000 K. $B_e = 10,59 cm^{-1}$ e $k_B = 0,695 cm^{-1} K^{-1}$.