

## QFL – 1242, FÍSICO-QUÍMICA II

PROVA 2 – 05/11/2020

### PROVA E

1. As soluções da equação de Schrödinger do problema da partícula na caixa unidimensional de comprimento  $0 < x < L$  são:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right), n = 1, 2, 3, \dots$$

Demonstre que quaisquer duas soluções  $\Psi_n(x)$  e  $\Psi_m(x)$  são ortogonais.

2. Considerando a molécula  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  como um oscilador harmônico, a energia do ponto zero é  $17,8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . Calcule a energia do ponto zero para  $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$ ?

3. Considere um oscilador harmônico tridimensional,  $V(x, y, z) = \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_y y^2 + \frac{1}{2}k_z z^2$ , em que as três constantes de força  $k_x$ ,  $k_y$  e  $k_z$  são diferentes. **a)** Escreva a expressão dos níveis de energia vibracional. **b)** Qual é a energia do ponto zero?

4. Considere um corpo macroscópico de 45 g oscilando com frequência de 2,4 vibrações por segundo. **a)** Calcule a constante de força da mola. **b)** Se a energia máxima resulta de uma amplitude de oscilação de 4,0 cm, qual seria o número quântico correspondente ao estado vibracional num tratamento quântico desse oscilador?

5. O comprimento de ligação da molécula CO é 112,8 pm. Calcule o número de onda (em unidade  $\text{cm}^{-1}$ ) correspondente à transição entre o estado rotacional fundamental e o primeiro estado rotacional excitado da molécula CO.