

Introdução à Física Atômica e Molecular (4300315)

Professor: Sylvio Canuto

1o semestre de 2021

2ª Lista de Exercícios

- 1) Considere uma molécula diatômica AB cuja constante rotacional vale 21 cm^{-1} .
Obtenha:
- O comprimento de onda da transição entre os níveis rotacionais $J=0$ e $J=1$.
 - O nível rotacional mais populado se a molécula estiver numa temperatura de 300K.
- 2) A frequência vibracional da molécula diatômica CO é $\nu = 2143 \text{ cm}^{-1}$. Qual deve ser a temperatura T (em K) para que o primeiro estado excitado tenha uma população que seja 20% da população do estado fundamental?
- 3) Para uma certa molécula diatômica a transição vibracional $0 \rightarrow 1$, ocorre em 2900 cm^{-1} . Sabendo que a constante rotacional é $B = 10 \text{ cm}^{-1}$, obtenha os valores das duas primeiras frequências correspondentes aos ramos P e R rovibracionais.
- 4) Rigorosamente, a constante rotacional de uma molécula diatômica depende do número quântico vibracional ν e, portanto, $B=B_\nu$.
- Obtenha as duas primeiras transições dos ramos R e P fazendo essa distinção.
 - Sabendo que para uma certa molécula diatômica obtém-se (em cm^{-1}) na transição vibracional $0 \rightarrow 1$: $\nu_{R0} = 2242,1$; $\nu_{R1} = 2254,4$; $\nu_{P1} = 2216,3$; $\nu_{P2} = 2203,7$, determine as constantes rotacionais B_0 e B_1 (em cm^{-1}).
- 5) Considere os seguintes resultados obtidos experimentalmente para a separação dos níveis vibracionais de uma molécula diatômica.

$\nu' - \nu''$	1-0	2-1	3-2	4-3	5-4
$G(\nu+1) - G(\nu) / \text{cm}^{-1}$	840	810	780	750	720

- Obtenha a população relativa do primeiro estado vibracional excitado.
 - Determine a frequência vibracional e a constante anarmônica.
 - Qual a frequência do primeiro e segundo *overtone*s.
 - Obtenha uma estimativa de quantos estados vibracionais existem.
 - Obtenha uma estimativa da energia de ligação D_0 e da energia D_e dessa molécula.
- 6) Considere os seguintes resultados obtidos experimentalmente para a separação dos níveis rotacionais de uma molécula diatômica e determine os valores da constante rotacional e constante de correção centrífuga. Explique.

$J - J+1$	0-1	1-2	2-3	10-11
$F(J+1) - F(J) / \text{cm}^{-1}$	20	40	60	218

- 7) Qual dessas moléculas diatômicas exibe atividade rotacional, vibracional, ambas ou nenhuma: H_2 , N_2 , CO, HF ? Explique.