

**Introdução à Física Atômica e Molecular (4300315)**  
**Professor: Sylvio Canuto**  
**1o semestre de 2021**  
**2ª Lista de Exercícios (parte 2)**

- 1) A primeira linha Stokes e a primeira linha anti-Stokes do espectro Raman rotacional de uma molécula diatômica homonuclear estão separadas por  $24 \text{ cm}^{-1}$ . Qual o valor de sua constante rotacional?
- 2) No caso Raman, a regra de seleção vibracional continua sendo  $\Delta v = \pm 1$ , mas a regra de seleção rotacional muda para  $\Delta J = \pm 2$ . Isso dá origem aos ramos O (Stokes) e S (Anti-Stokes). Considere que a constante rotacional  $B$  é a mesma para ambos os casos e despreze correções centrífugas e anarmônicas. Deduza então as posições das transições rovibracionais associadas a esses dois ramos.
- 3) O espectro Raman rotacional de uma molécula diatômica (HBr) foi medido resultando numa linha Rayleigh localizada em  $19430 \text{ cm}^{-1}$  e outras linhas observadas em  $19345.2$ ,  $19379.12$ ,  $19480.88$  e  $19514,80 \text{ cm}^{-1}$ . Calcule a constante rotacional  $B$  (em  $\text{cm}^{-1}$ ) e assinale esse valores às correspondentes transições observadas. Usando esse valor de  $B$  determine qual o nível rotacional  $J$  mais populado à temperatura de 300 K.
- 4) Metil-acetato e Etil-metanoato (ou etil-formiato) são isômeros, ou seja, tem a mesma fórmula química ( $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$ ) embora suas estruturas moleculares sejam distintas (veja a figura abaixo).

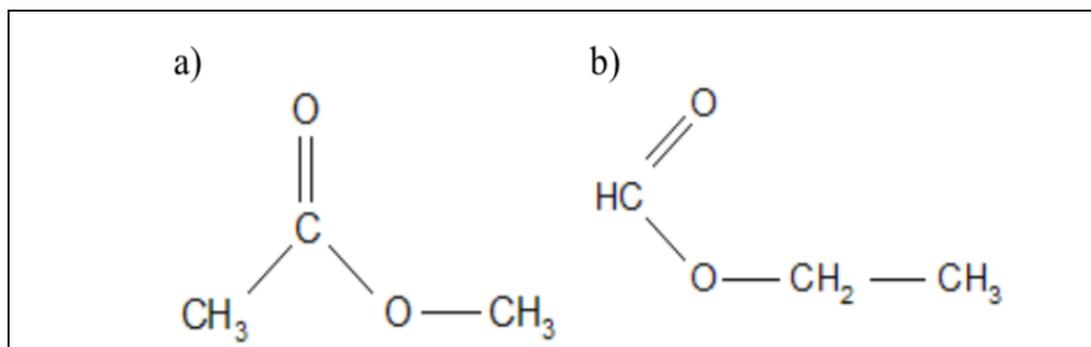


Figura 1: As moléculas a) metil-acetato e b) etil-metanoato.

A qual dessas duas moléculas se refere o espectro de NMR abaixo? Justifique.

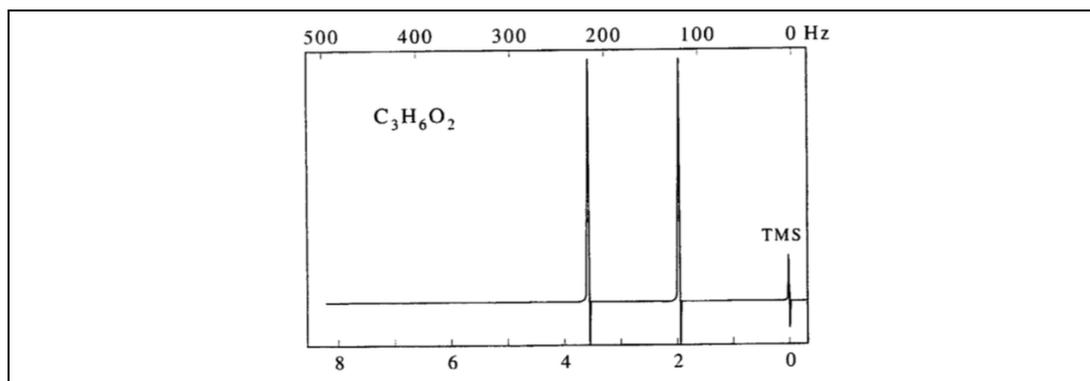


Figura 2: Espectro NMR do  $^1\text{H}$  da molécula ( $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$ ).

- 5) Considere o espectro de  $^{13}\text{C}$  da molécula de fulereno ( $\text{C}_{60}$ ). Quantas linhas NMR você espera nesse espectro?
- 6) O espectro NMR do Oxigênio da molécula de  $\text{CO}_3$  possui dois picos distintos. Supondo que essa molécula é planar, como é sua geometria?