

ZAB1033 – Fundamentos da Estrutura Eletrônica da Matéria

5ª Lista de Exercícios

1 – Calcule a frequência da transição $J = 2 \rightarrow 3$ no espectro de rotação pura do $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ ($m_{\text{N}} = 14\text{u}$ e $m_{\text{O}} = 16\text{u}$). O comprimento da ligação no equilíbrio é 115 pm.

2 – O espectro de rotação pura do O_2 apresenta a terceira linha posicionada em 2052 cm^{-1} . Calcule, a) o valor da constante de rotação, b) A separação entre duas linhas adjacentes e c) a posição da 8ª linha.

3 – O número de onda da radiação incidente num espectrômetro Raman é 20487 cm^{-1} . Qual o número de onda da radiação Stokes espalhada na transição $J = 2 \rightarrow 4$ do $^{14}\text{N}_2$?

4 – Para a molécula de O_2 os valores de ΔG das transições $v = 0 \rightarrow 1$, $0 \rightarrow 2$ e $0 \rightarrow 3$ são respectivamente, 2345, 4661 e 6984 cm^{-1} . Calcule $\tilde{\nu}$ e χ_e .

5 – A absorção do $^1\text{H}^{81}\text{Br}$ ($\tilde{\nu} = 2649\text{ cm}^{-1}$) no infravermelho gera um ramo R a partir de $v = 0$. Qual o número de onda que se origina no estado de rotação com $J = 2$?

6 – Quantos modos normais de vibração tem cada molécula: a) H_2O , b) H_2O_2 , c) C_2H_4 , d) C_6H_6 , e) $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$, e f) $\text{HC} \equiv \text{C} - \text{C} \equiv \text{HC}$.

7 – A constante de rotação do CO ($m_{\text{C}} = 12\text{ u}$ e $m_{\text{O}} = 16\text{ u}$) é $1,9314\text{ cm}^{-1}$ no estado fundamental e $1,6116\text{ cm}^{-1}$ no primeiro estado excitado de vibração. De quanto se altera a distância entre os núcleos em consequência dessa transição?

8 – Obtenha a expressão para o espectro de vibração-rotação de uma molécula que possui transição vibracional $v \rightarrow v + 1$ e transição rotacional $J \rightarrow J + 1$.

$$u = 1,66 \times 10^{-27}\text{ kg}$$