|  |
| --- |
| **Lista Espectroscopia e Laser. Físico - Química IV**Profª Drª Ana Paula Ramos |

1. Quais são as condições para que seja observada inversão de população em um sistema contendo N átomos? Explique
2. A linha fundamental no espectro de infravermelho do 12C16O ocorre em 2143 cm-1 e o primeiro *overtone* ocorre em 4260 cm-1. Calcule os valores de para 12C16O.
3. O comprimento de ligação do 12C14N é 117 pm e sua constante de força 1630 N/m. Prediga o espectro roto-vibracional desta molécula.
4. O espaçamento entre as linhas no espectro de micro-ondas do H35Cl é 6,350.1011 Hz. Calcule o comprimento de ligação do H35Cl.
5. A constante de força k da molécula 79Br79Br é 240 N.m-1. Calcule a frequência de vibração fundamental e o ponto zero de energia do 79Br2.
6. A distancia internuclear de equilíbrio para H127I é 160.4 pm. Calcule o valor da constante rotacional B em número de onda e MHz.
7. Dado B = 588 000 MHz e = 2160.0 cm-1 para o CO, calcule as frequências das primeiras linhas dos ramos R e P do espectro roto-vibracional do CO.
8. Quais as unidades dos coeficientes de Einstein A e B. Como estes estão relacionados aos processos de absorção e emissão nos átomos e moléculas?
9. O símbolo do termo do estado fundamental para O2+ é 2Πg. O primeiro estado eletrônico excitado está a 38795 cm-1 acima do estado fundamental e possui símbolo do termo 2Πu. O decaimento 2Πu → 2Πg para a molécula O2+ é um exemplo de fluorescência ou fosforescência? Explique. (exercício 15.1 MacQuarrie)
10. O que é um modo vibracional? Determine os graus de liberdade translacional, rotacional e vibracional para as seguintes moléculas: NH3, CO2, CHCl3, CH4.
11. Quais são as correções introduzidas nos modelos do rotor rígido e oscilador harmônico para os desvios observados nos espectros rotacionais e roto-vibracionais respectivamente? A que se devem estes desvios e quais são seus efeitos nos espectros? Explique por meio de equações.

