QFL-1242 FÍSICO-QUÍMICA II
2ª Lista de Exercícios

1. Calcule a energia do ponto zero de um oscilador harmônico com uma partícula de massa de $5{,}16\times10^{-26}\,kg$ e constante de força de $285\ N.m^{-1}$.

2. Em um oscilador harmônico constituído por uma partícula de massa de $2{,}88\times10^{-25}\,kg$, a diferença entre os níveis de energia adjacentes é $3{,}17\times10^{-21}\,J$. Calcule a constante de força do oscilador.

3. Calcule as energias mínimas de excitação de (a) um cristal de quartzo de relógio que vibra a 33 Hz, e (b) da ligação entre dois átomos de O na molécula de O_2, na qual $k = 1177\ N.m^{-1}$.

4. Localize os nós da função de onda do oscilador harmônico com $\mathrm{v} = 5$.

5. Verifique se a função de onda no estado fundamental do oscilador harmônico linear unidimensional, dada a baixo, é uma solução da Equação de Schrödinger do oscilador e de o autovalor correspondente.

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2},\ \ \alpha = \frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar}$$

6. O valor de massa utilizado na expressão da frequência vibracional de uma molécula diatômica é a sua massa efetiva $\mu = m_A m_B/(m_A + m_B)$ em que m_A e m_B são as massas dos átomos. Os seguintes dados dos números de onda (em cm^{-1}) das linhas de absorção de infravermelho são da publicação *Spectra of diatomic molecules*, G. Herzberg, van Nostrand (1950):

$H^{35}Cl$	$H^{81}Br$	HI	CO	NO
2990	2650	2310	2170	1904

Calcule as constantes de força das ligações, dispondo-as na ordem da rigidez crescente.

7. Normalize as funções de onda ψ_0 e ψ_1 do oscilador harmônico e mostre que elas são ortogonais.

8. Calcule o valor médio da posição e do momento para qualquer estado **v** do oscilador harmônico.

9. Uma massa puntiforme gira num círculo com $l = 1$. Calcule o módulo do momento angular da partícula e as projeções possíveis do momento angular sobre um eixo arbitrário. Repita para $l = 2$.

10. A transição $l = 0 \rightarrow l = 1$ para o $^{12}C^{16}O$ ocorre em 1,153x10^5MHz. Calcule o comprimento da ligação.

11. Mostre que $\hat{L}^2$ comuta com $\hat{L}_z$. Mostre também que $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ e $\hat{L}_z$ não comutam entre si.

12. Devido a grande diferença entre as massas dos átomos em uma molécula de $^1H^{127}I$, é apropriado pensar no movimento rotacional dessa molécula como o átomo de ^1H descrevendo uma órbita estacionária em torno do átomo de ^{127}I, numa distância de 160 pm (o comprimento da ligação em equilíbrio). (a) Qual o valor do momento de inércia dessa molécula? (b) Qual o valor de energia para os três primeiros níveis rotacionais (em Joule)? (c) Qual o valor de frequência da luz absorvida que promove a transição de $J = 0 \rightarrow J = 1$? (d) O que mudaria nos resultados anteriores se a molécula fosse $^2H^{127}I$?