

(1º de abril de 2017) "Oscilações"

Considerando o modelo de Lennard-Jones,

$$U(r) = D \left[ \left( \frac{R_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{R_0}{r} \right)^6 \right],$$

calcule para o CO<sub>2</sub>:

- a) a energia potencial mínima,
- b) o equivalente da constante de mola k, supondo que os átomos de oxigênio estão fixos no espaço e apenas o átomo de carbono oscile,
- c) a frequência em Hz para as oscilações em torno de R<sub>0</sub>.
- d) o comprimento de onda correspondente à esta frequência.

Dados:

$$D = 1,34 \cdot 10^{-18} \text{ J (por ligação C=O, no CO}_2 \text{ } 2,67 \cdot 10^{-18} \text{ J)}$$

$$R_0 = 116 \text{ pm}$$

$$C : 12,0 \text{ g/mol, O: } 16,0 \text{ g/mol}$$

Compare o resultado com o número de onda previsto para o estiramento assimétrico do Co<sub>2</sub> (2350 cm<sup>-1</sup>). Proponha um modelo que melhor se aproxime do resultado experimental.