USP Instituto de Física

Exercícios Sugeridos do Livro Texto
Moléculas

A numeração corresponde ao livro texto.

43.1 A separação entre os íons K^+ e Cl^- na molécula de KCl é $2,8 * 10^{-10}m$. Admitindo que os dois íons se comportem como se fossem cargas puntiformes: (a) determinar a força de atração entre eles e (b) determinar a energia potencial atrativa em eV.

43.3 Com os dados da Tabela dada no exercício 43.5, a seguir, calcule a massa reduzida da molécula de NO. Compare o resultado com a massa que se obtém da expressão $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$.

43.4 A molécula de CO pode fazer uma transição do estado rotacional com $J = 1$ para o estado com $J = 2$ quando absorve um fóton de freqüência $2,30 * 10^{11} Hz$. Achar o seu momento de inércia.

43.5 Usar os dados da Tabela ao lado para calcular a amplitude mínima de vibração (a) da molécula de HI, e (b) da molécula de HF. Qual das duas moléculas tem a ligação mais fraca?

Tabela 43.2: Freqüências de vibração e constantes de força de algumas moléculas diatômicas.

Molécula	Freqüência ν=0→1 ($10^{13} Hz$)	Constante de Força ($10^3 N/m$)
HF	8,72	0,97
HCl	8,66	0,48
HBr	7,68	0,41
HI	6,69	0,32
CO	6,42	1,86
NO	5,63	1,53

P3.Q1 A energia potencial entre os átomos numa molécula de H_2 é dada por

$$U(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6},$$

onde r é a distância entre os dois núcleos, $A = 0,124 \times 10^{-12} eV \cdot nm^{12}$ e $B = 1,488 \times 10^{-6} eV \cdot nm^6$.

a) Determine o valor da separação de equilíbrio entre os átomos de hidrogênio, r_0.

b) Determina o valor da energia potencial na separação de equilíbrio.

A energia total (rotacional e vibracional) da molécula de H_2 é

$$E(J, \nu) = U(r_0) + \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) + (\nu + \tfrac{1}{2}) hf,$$

onde I é o momento de inércia para rotação em torno do centro de massa e $f = 1,32 * 10^{14} Hz$ é a constante vibracional. A massa de um átomo de hidrogênio é $m_H = 1,007\,825u$.

c) Determine o comprimento de onda do fóton que deve ser absorvida por uma molécula de H_2 para que ela passe do estado rotacional fundamental para o primeiro estado excitado.

d) Calcule o comprimento de onda do fóton emitido quando a molécula decai do estado $(\nu = 1, J = 1)$ para o estado fundamental.

P2.Q4 O potencial de Lennard-Jones que une os átomos de hidrogênio (de massa $m = 1,67 * 10^{-27} kg$) numa molécula de H_2 é dado, em função da distância entre os dois prótons r, por

$$U(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}, \text{ com } A = 0,124 * 10^{-120} eV\, m^{12} \text{ e } B = 1,488 * 10^{-60} eV\, m^6.$$

a) Mostre que a distância de equilíbrio entre os prótons na molécula de H_2 é $r_0 = 0,074nm$.

A energia total (rotacional e vibracional) da molécula de H_2 é

$$E = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) + (\nu + \tfrac{1}{2}) hf,$$

onde I é o momento de inércia para rotação em torno do centro de massa e $f = 1,32 * 10^{14} Hz$ é a constante vibracional.

b) Calcule a diferença de energia, em eV, entre o estado $(\nu = 1, J = 1)$ e o estado fundamental.

c) Determine o comprimento de onda da radiação emitida na transição entre os dois estados descritos no ítem anterior e indique a sua localização no espectro eletromagnético (raios-X, ultra-violeta, visível, infra-vermelho ou micro-ondas).

P3.Q1 A energia de transição entre os estados rotacionais com $J = 0$ e $J = 1$, na molécula de CO, corresponde a uma freqüência de $1,15 * 10^{11} Hz$, enquanto que a freqüência fundamental de vibração da molécula é de $6,42 * 10^{13} Hz$. Considere que as massas atômicas dos elementos C e O como $m_C = 12u$ e $m_O = 16u$.

a) Calcule a massa reduzida da molécula de CO, μ (em kg).

b) Determine o momento de inércia da molécula I (em kg m^2).

c) Calcule o comprimento de equilíbrio da ligação da molécula, r_0 (em m).

d) Calcule a constante de força desta molécula, K (em N/m).