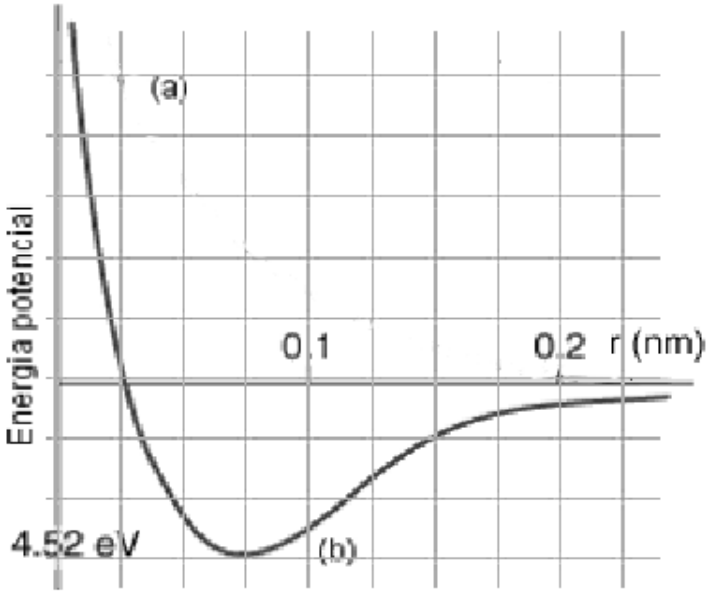
if USP	**Física para Ciências Biológicas** 1º Semestre 2011 Período Diurno/Noturno LISTA DE EXERCÍCIOS 5 (casa)

1. aguarde que ele está sendo corrigido e será disponibilizado em breve.

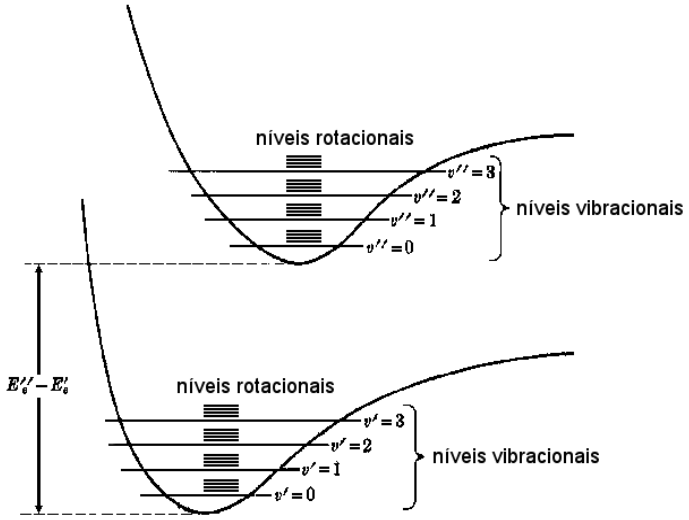
2. No exercício 20 da lista lista 5-c de casa abordamos a molécula de H2, cuja curva de energia potencial (com a molécula no estado fundamental) entre os átomos de H em função da distância r entre os dois átomos é dado pelo gráfico a baixo.



a) Faça o esboço do gráfico da energia potencial V(r) na aproximação harmônica para este sistema e calcule a constante elástica k.

b) Supondo que a energia total do sistema fosse de -3eV, qual seria a amplitude da vibração?

3. Na figura abaixo vemos representadas esquematicamente as curvas de energia potencial para dois estados eletrônicos E_e' e E_e'', em uma determinada molécula.



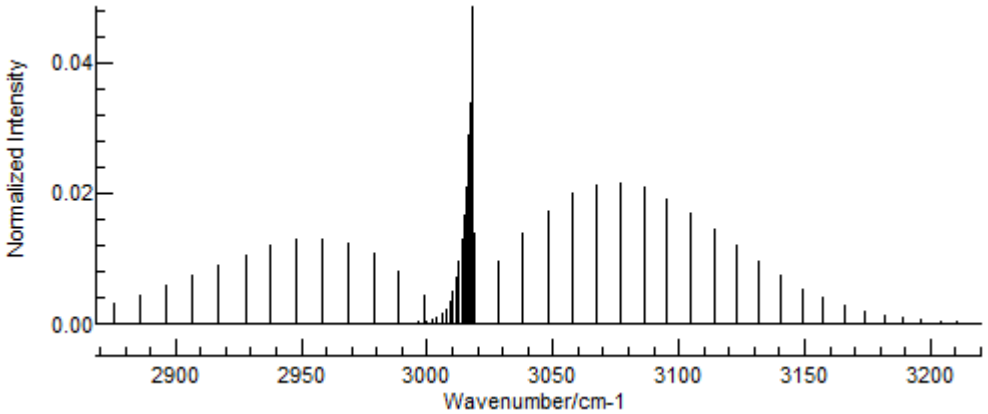
a) A energia envolvida nas transições vibracionais é maior, menor ou igual à energia necessária para transições rotacionais? Justifique com base no gráfico.

b) Preencha a tabela abaixo utilizando valores típicos para as diferentes diferentes transições quânticas nestes sistemas moleculares.

	Transição Eletrônica	Transição vibracional	Transição Rotacional
Energia			
Comprimento de onda			
Região do Espectro			

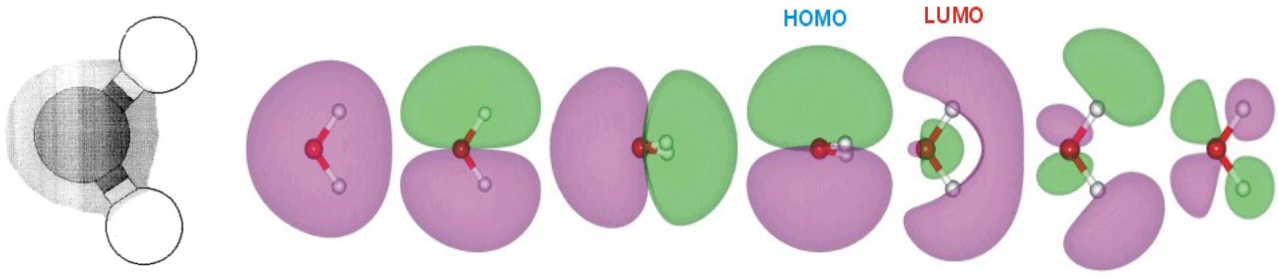
4. Considere uma transição entre os níveis vibracionais $v' = 0$ e $v' = 1$, da figura qualitativa do exercício anterior, ambos no seu estado rotacional mais baixo. Suponha que esta transição ocorre com a absorção de um fóton de número de onda $\nu = 1/\lambda = 3015 cm^{-1}$.

a) O que aconteceria com este valor caso o sistema começasse num nível rotacional mais alto (terminando ainda no nível rotacional mais baixo de $v' = 1$)?
b) E se, começando no nível rotacional mais baixo para o nível vibracional $v' = 0$, terminasse num nível rotacional mais alto?
c) Com base nas respostas anteriores, explique o que são os traços ao redor do pico principal de absorção no espectro abaixo, do metano:



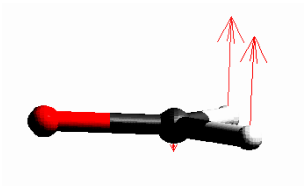
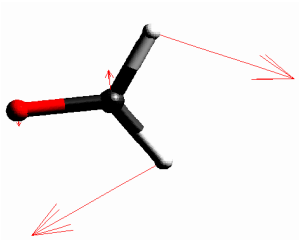
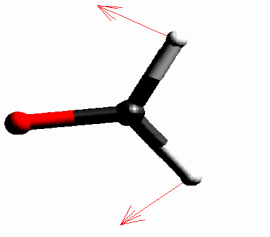
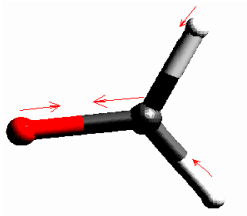
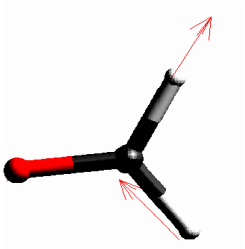
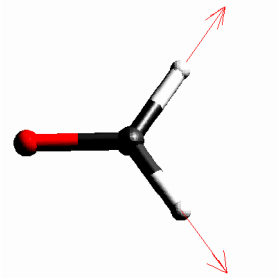
fonte: Wikipedia

5. Abaixo estão ilustradas, nessa ordem, a densidade de carga eletrônica total da molécula de água, e alguns orbitais moleculares.



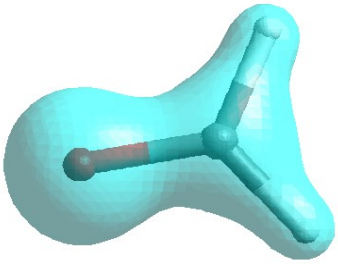
a) A partir da figura da densidade eletrônica total, comente o fato de a molécula de água ser "polar".
b) Para que ocorra uma transição eletrônica entre os orbitais da molécula de água, um elétron será "retirado" do orbital ocupado e "colocado" em um orbital vazio. Lembrando que a luz é oscilação eletromagnética, você pode estimar se a transição HOMO-LUMO acopla com a luz? Explique.
c) De sua experiência cotidiana, se a luz acoplar com essa transição, a partir de que faixa de frequências ela deve estar?

6. Uma molécula pode vibrar de várias maneiras diferentes, mas sabemos que podemos reproduzir qualquer dessas maneiras em termos de algumas vibrações fundamentais, ou modos de vibração "normais". Para a molécula de formaldeído, $H_2C = O$, os modos vibracionais são identificados abaixo (as setas representam esquematicamente o movimento dos átomos).

 1167cm^{-1}	 1249cm^{-1}	 1500cm^{-1}
 1746cm^{-1}	 2843cm^{-1}	 2783cm^{-1}

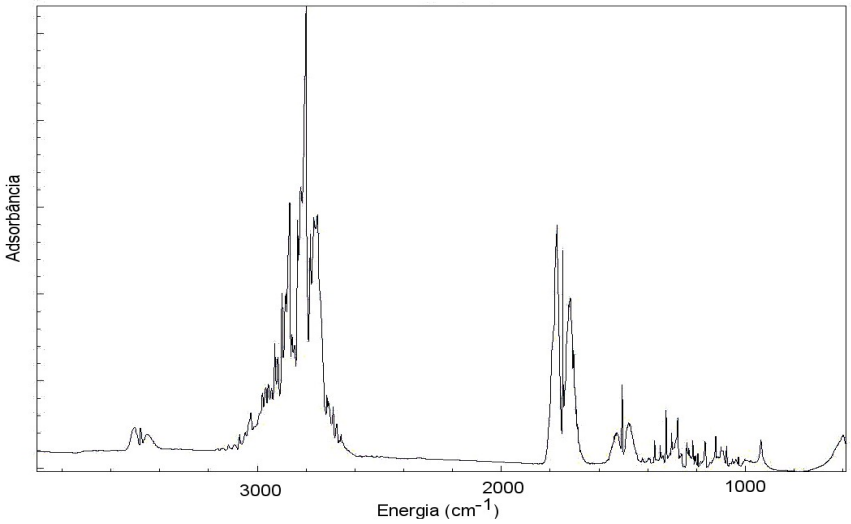
$1\text{cm}^{-1} = 1{,}2 \times 10^{-4}$ eV.

A densidade eletrônica total calculada a partir dos orbitais atômicos para esta molécula é mostrada ao lado.



a) Represente o vetor momento de dipolo elétrico para esta molécula se ele existir; ele tem efeito sobre o espectro de absorção na região vibracional? Comente.

b) No gráfico experimental abaixo é medida a adsorbância (taxa de radiação absorvida com respeito à radiação incidente) em função da energia da radiação incidente sobre uma amostra gasosa de formaldeído. Identifique no gráfico os picos associados aos modos de vibração descritos acima. Comente sobre as diferentes intensidades de absorção.



7. De maneira geral as vibrações dos pares de átomos, ainda que perturbadas pela estrutura dos demais átomos a eles ligados, são bastante úteis na identificação em laboratório das moléculas químicas presentes nas amostras.

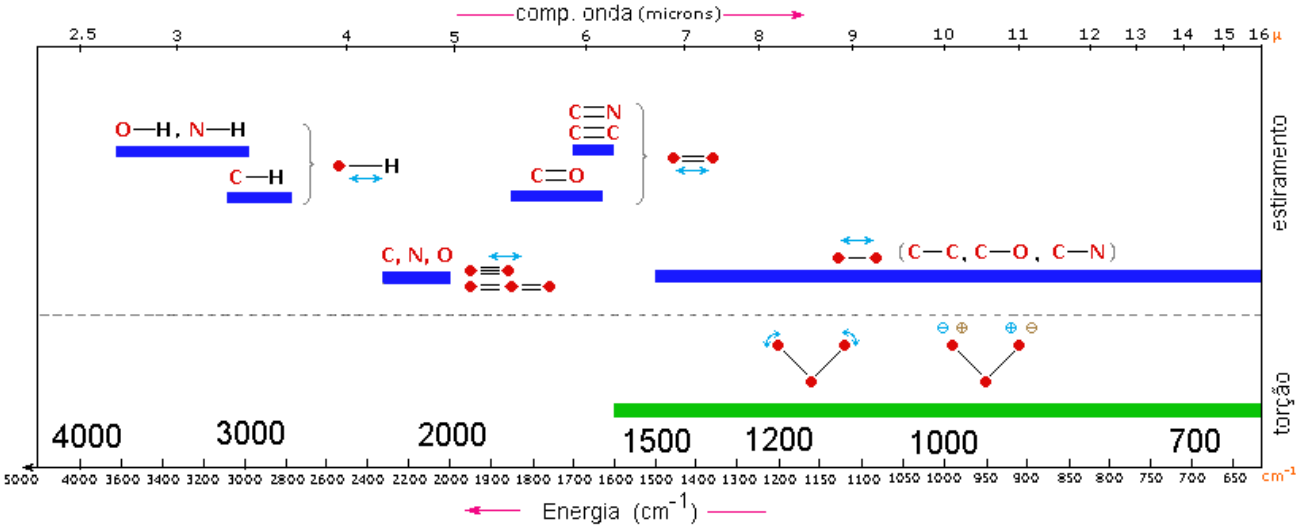
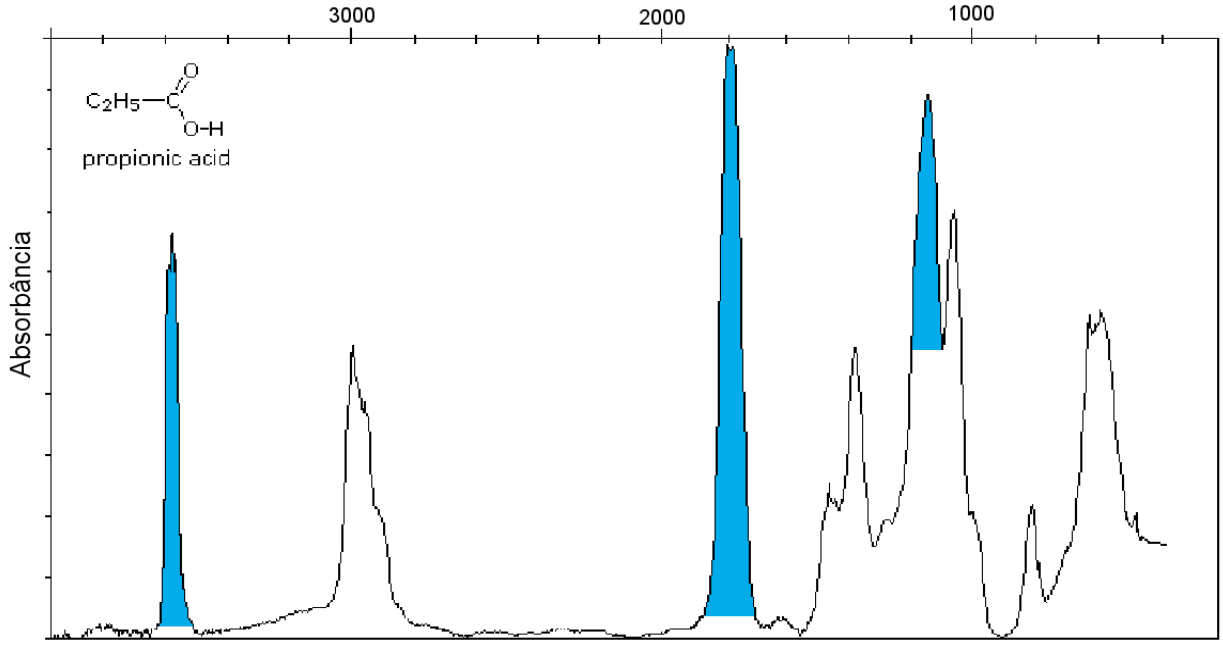


imagem: *http://www.cem.msu.edu/~reusch/VirtualText/Spectrpy/InfraRed/infrared.htm*

a) No espectro abaixo, de uma amostra gasosa de acido propiônico, identifique as possíveis estruturas associadas aos picos sombreados.



b) Você espera que amostras em fase líquida apresentaria espectro diferente? Discuta.

c) Que vantagem experimental haveria em se utilizar espectros de infravermelho com respeito à radiação de menores comprimentos de onda como Raios X?