

**INSTITUTO POLITÉCNICO DE TOMAR**  
**ESCOLA SUPERIOR DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA INDUSTRIAL**

***INTRODUÇÃO À QUÍMICA-FÍSICA***

**PROBLEMAS - NÍVEIS DE ENERGIA DAS MOLÉCULAS E ESPECTROSCOPIA**

- 1.** A radiação na região do infravermelho tem uma frequência típica da ordem de  $1000 \text{ cm}^{-1}$ . Para este valor, calcular  $\nu$ ,  $\lambda$ , e  $\Delta E$ .
- 2.** Indicar os graus de liberdade translacionais, rotacionais e de vibração para as moléculas seguintes: HCl, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>S.
- 3.** Calcular a relação entre o nº de moléculas que se situam entre dois níveis de energia separados por si de  $0.4 \times 10^{-21} \text{ J}$ , à temperatura de  $25 \text{ }^\circ\text{C}$ . Comparar com o valor obtido para  $kT$  e tirar conclusões.
- 4.** Calcular o momento de inércia da molécula de monóxido de azoto, NO, cujo comprimento de ligação de equilíbrio é  $1.151 \text{ \AA}$ . Para esta molécula, determinar os valores dos quatro primeiros níveis de energia rotacionais.
- 5.** Estimar o comprimento de onda e a frequência para a transição  $J = 0 \rightarrow 1$  na molécula de  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ . As massas dos dois átomos são  $1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$  e  $5.807 \times 10^{-26} \text{ kg}$  e a distância interatómica de equilíbrio é  $127.4 \text{ pm}$ .
- 6.** A molécula de HCl tem uma constante de força de  $516 \text{ Nm}^{-1}$ . Calcular a frequência de vibração,  $\omega$ , da molécula e a diferença de energia entre dois níveis contíguos.
- 7.** Indicar quais das moléculas possuem espectro vibracional de absorção: H<sub>2</sub>, NO, N<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub>, OCS, CH<sub>2</sub>=CH<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>.
- 8.** Calcular a amplitude das vibrações para o nível  $\nu = 0$  da molécula de HCl, que tem uma ligação forte e para o mesmo nível da molécula de HI que tem uma ligação química mais fraca. HCl  $k (\text{Nm}^{-1}) = 516$  ; HI:  $k (\text{Nm}^{-1}) = 314$ .