

Faculdade de Ciências
Departamento de Física

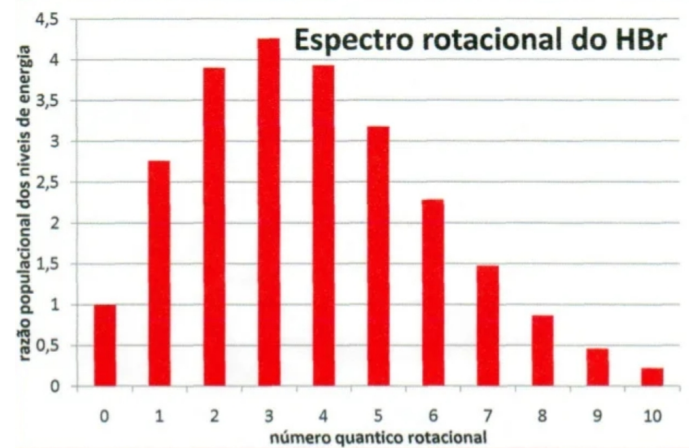
Curso de Licenciatura em Física

DISCIPLINA: ESPECTROSCOPIA

Aula Prática III Espectroscopia Rotacional

1. A figura mostra a distribuição da população relativa nos estados rotacionais para a molécula do ácido bromídrico. Determine:

- (a) O estado físico da molécula;
- (b) A constante rotacional em unidades espectroscópicas a 27°C ;
- (c) O número de onda, em unidades espectroscópicas, correspondente à máxima transição rotacional.



2. A molécula de monóxido de carbono exibe a primeira linha do seu espectro puramente rotacional a 3.84235 cm^{-1} . Determine:

- (a) O momento de inércia e a distância inter-atômica;
- (b) O número quântico máximo a 27°C .

3. O espectro rotacional de $^{79}\text{Br}^{19}\text{F}$ mostra uma série de linhas de absorção igualmente espaçadas em 0.71433 cm^{-1} . Determine;

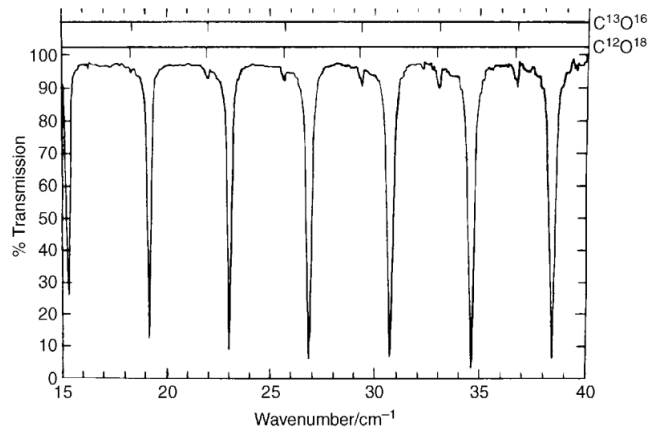
- (a) A constante rotacional em unidades espectroscópicas;
- (b) O momento de inércia;
- (c) A transição que corresponde a maior linha da intensidade espectral para 300 K .

4. A molécula de HCl executa movimentos rotacionais de forma não rígida. Sabendo que a distância inter-atômica é 1.275 Å no equilíbrio e o coeficiente de distorção centrífuga é $5.3 \times 10^{-4}\text{ cm}^{-1}$. Determine:

- (a) A energia de transição da terceira ordem em unidades espectroscópicas;

- (b) O número quântico máximo a 25°C ;
- (c) A frequência de vibração e a constante de força da molécula.

5. A figura mostra o espectro rotacional na região do IV distante de dois isótipos da molécula de CO .



Calcule:

- (a) A separação média das transições rotacionais da molécula de $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$;
 - (b) O raio de ligação da molécula de $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$.
6. A constante rotacional para $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ observada é $44,315.97 \text{ Megaciclos}$ e o seu isótopo $\text{D}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ exibe $36,207.97 \text{ Megaciclos}$. Calcule:
- (a) O momento de inércia destas moléculas;
 - (b) O raio de ligação entre H^{12}C e $^{12}\text{C}^{14}\text{N}$.
7. O espectro da molécula do CH_4 a 25°C exibe linhas equidistantes correspondentes às suas transições rotacionais. Determine:
- (a) Os valores de energias rotacionais para os dois primeiros estados rotacionais;
 - (b) O número de onda da transição fundamental;
 - (c) O espectro de frequências.
8. A molécula de CH_3Br executa movimentos rotacionais de forma rígida. Dadas as constantes rotacionais $\tilde{A} = 5.08 \text{ cm}^{-1}$ e $\tilde{B} = \tilde{C} = 0.31 \text{ cm}^{-1}$. Determine:
- (a) A geometria da molécula;
 - (b) A energia do estado fundamental em $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$;
 - (c) A frequência de absorção na transição para $J = 10$ e represente o diagrama da respectiva linha espectral.