



Faculdade de Ciências  
Departamento de Física

Curso de Licenciatura em Física

**DISCIPLINA: ESPECTROSCOPIA**

**Aula Prática I Introdução à Espectroscopia: Conceitos Gerais**

---

1. Indica quais são os tipos de transições de nível de energia molecular estão envolvidas na seguintes técnicas espectroscópicas: NMR, IR, UV-Vis, Fluorescência.
2. Deduza, de acordo com o princípio de Bohr, a expressão que prediz as frequências de emissão e absorção da radiação electromagnética e analise o coeficiente da função  $\bar{\nu}(n)$ , para o átomo de hidrogénio.
3. Calcule o número de onda da transição de  $n = 166$  a  $n = 167$  no átomo de hidrogénio. Explique o significado desse resultado.
4. Demonstre que no equilíbrio, a maior parte de moléculas ocupam níveis de energia mais baixa.
5. Uma determinada transição envolve energia de  $4.005 \times 10^{-22} \text{ J molécula}^{-1}$ . Se existe 1000 moléculas no estado fundamental, qual é a população de equilíbrio dos estados excitados a 29K?
6. Identifique cada elemento básico e a sua função num espectrómetro. Qual destes elementos é responsável pela transdução do sinal espectral?
7. Numa solução de 5.0 mM, um soluto absorve 90% de uma luz visível à medida que o feixe passa através de uma célula de 80 mm. Calcular a absorvidade molar deste soluto.
8. Calcule a absorvância (A) com absorção molar de  $6.17 \text{ L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ,  $c = 0.52 \text{ M}$  quando um determinado comprimento de onda passa por uma célula de 2.3 cm.
9. Um espectrómetro RMN digitaliza uma amostra e exibe uma relação sinal-ruído (S/N) de 2.0. Quanto tempo levaria o técnico para gerar um espectro com uma relação S/R de 40? Suponha que ele gastava 5 minutos por cada teste.
10. Calcule em Hertz, a largura da banda da transição no HCN a  $25^\circ \text{C}$  devido ao efeito Doppler na região espectral dos seguintes números de onda: (a)  $10 \text{ cm}^{-1}$  (b)  $1500 \text{ cm}^{-1}$  (c)  $60000 \text{ cm}^{-1}$

11. Calcule a largura da banda espectral, em Hertz, para o benzeno sob 1 Torr e 293K, sabendo que o número de colisões por unidade de tempo que as moléculas de um gás efectivamente efectuam, se existe uma única espécie de substância, é dado como;

$$N = \frac{\pi d^2 P}{kT} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$$

Onde; d é o diametro de colisão e igual a 50nm.