

## 1ª de Exercícios de Interações Atômicas e Moleculares - 1º quadrimestre 2014

## Questões

1-) Resolva as seguintes equações diferenciais:

a-)

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x(t) = 0 \quad x(0) = 0; \quad \frac{dx}{dt}(t=0) = v_0$$

b-)

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x(t) = 0 \quad x(0) = A; \quad \frac{dx}{dt}(t=0) = v_0$$

2-) Prove que:

$$y(x, t) = A \operatorname{sen} \left[ \frac{2\pi}{\lambda} (x - vt) \right]$$

é uma onda com comprimento  $\lambda$  e frequência  $\nu = v/\lambda$  viajando para a direita com velocidade  $v$ .

3-) Verifique que  $x(t) = A \operatorname{sen} \omega t + B \cos \omega t$ , onde  $\omega = (k/m)^{1/2}$  é uma solução para a equação de Newton do oscilador harmônico

4-) na região do infravermelho do  $\text{H}^{79}\text{Br}$  há uma linha intensa em  $2630 \text{ cm}^{-1}$ . Calcule a constante de força do  $\text{H}^{79}\text{Br}$  e o período de vibração do  $\text{H}^{79}\text{Br}$ .

5-) Considere uma molécula de HI vibrando como um átomo de I imóvel e um átomo de H que oscila aproximando-se e afastando-se do átomo de I. Sendo que a constante de força de ligação do HI igual a  $314 \text{ N.m}^{-1}$ , calcule (a) a frequência de vibração da molécula. (b) o comprimento de onda necessário para excitar a molécula para a vibração

6-) Verifique que  $\psi_1(x) = \left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{1/4} x e^{-\alpha x^2/2}$  e  $\psi_2(x) = \left(\frac{\alpha}{4\pi}\right)^{1/4} (2\alpha x^2 - 1) e^{-\alpha x^2/2}$  satisfazem a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico. .

7-) Em coordenadas cartesianas.

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Converta esta equação em coordenadas esféricas

8-) Em termos da variável  $\theta$ , A equação de Legendre é

$$\operatorname{sen} \theta \frac{d}{d\theta} \left( \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + (\beta^2 \operatorname{sen}^2 \theta - m^2) \Theta(\theta) = 0$$

Usando  $x = \cos \theta$  e  $P(x) = \Theta(\theta)$ , mostre que:

$$(1 - x^2) \frac{d^2 P(x)}{dx^2} - 2x \frac{dP(x)}{dx} + \left[ \beta - \frac{m^2}{1 - x^2} \right] P(x) = 0$$

9-) Para o primeiro estado excitado para  $n = 2$ ,  $l = 0$  e  $m = 0$ :

$$\psi_{200} = C_{200} \left( 2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0} :$$

(a) Mostre que a constante de normalização é dada por:

$$C_{200} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2}$$

(b) Calcule a densidade de probabilidade  $P(r)$  no ponto  $r = a_0$

10-) (a) O valor médio de  $r$  para o átomo de hidrogênio de uma forma geral é dado por:

$$\langle r \rangle_{nl} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}$$

Verifique a fórmula explicitamente para o orbital  $\psi_{211}$ .

(b) O valor médio de  $r^2$  para o átomo de hidrogênio de uma forma geral é dado por:

$$\langle r^2 \rangle_{nl} = \frac{n^4 a_0^2}{Z^2} \left\{ 1 + \frac{3}{2} \left[ 1 - \frac{l(l+1) - \frac{1}{3}}{n^2} \right] \right\}$$

Verifique a fórmula explicitamente para o orbital  $\psi_{210}$ .

11-) Mostre que a densidade de probabilidade dos orbitais  $3d$  é esfericamente simétrico avaliando  $\sum_{m=-2}^2 \psi_{32m}^2$

12-) Qual é o momento angular orbital (na forma de múltiplos de  $\hbar$ ) nos orbitais (a)  $1s$ ; (b)  $3s$ ; (c)  $3d$ ; (d)  $2p$ ; (e)  $3p$ ? Dê os números de nós angulares e radiais em cada caso. (f) Qual é o elemento químico que possui a configuração (g)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$  e (h)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

13-) (a) Explique o princípio da exclusão de Pauli. (b) Qual o papel da aproximação de Born-Oppenheimer na definição de uma estrutura molecular?

14-) Mostre que:

$$\psi_{sp} = \frac{1}{\sqrt{2}} (2s \pm 2p_z)$$

é normalizado.

15-) Os orbitais de átomos multieletrônicos são degenerados para um mesmo  $n$ ? Explique

sua resposta e defina o que é efeito de blindagem.

**16-)** Mostre que  $\Delta E_- = (J - K)/(1 - S)$  para o orbital anti-ligante  $\psi_-$  do  $H_2^+$

**17-)** As constante de força para as moléculas diatômicas indo do  $B_2$  até o  $F_2$  são dados na tabela abaixo. É a ordem que você esperava? Explique.

Molécula Diatômica	k (N.m <sup>-1</sup> )
B <sub>2</sub>	350
C <sub>2</sub>	930
N <sub>2</sub>	2260
O <sub>2</sub>	1140
F <sub>2</sub>	450

**18-)** Mostre explicitamente que um orbital  $s$  de uma átomo de hidrogênio e um orbital  $p_x$  de um outro átomo de hidrogênio tem superposição zero.

**19-)** Escreva a configuração eletrônica de mais baixa energia (estado fundamental) para os átomos de C, N, Ne, Cu, Cu<sup>+1</sup>, Cr e Cr<sup>+2</sup>. Escreva os números quânticos correspondentes a cada configuração.