

Interações Atômicas e Moleculares - 2014.2

Lista 1: Átomos e Moléculas

1. Que parte da função de onda de um campo central depende da energia potencial, e que parte resulta da simetria esférica?
2. Dê uma olhada nas partes radiais das funções de onda do átomo de hidrogênio $R_{nl}(r)$ (tabela 10.1 no Atkins ou vários sites no internet). Qual o comportamento assintótico (quando $r \rightarrow \infty$) das funções de onda do átomo de hidrogênio? Qual a dependência do comportamento com l , destas mesmas funções quando $r \rightarrow 0$?
3. O valor médio de r num átomo hidrogenóide é $\langle r \rangle = \frac{n^2 a_0}{Z} \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right]$
 - (a) Calcule $\langle r \rangle$ para todos os estados com $n = 1, 2, 3, 4$. Compare estes valores com os correspondentes raios de Bohr.
 - (b) Usando $\langle r \rangle$ como medida do tamanho da órbita ordene os estados nl de acordo com a distância média ao núcleo, para $n = 1, 2, 3, 4$.
4. Os orbitais de átomos multieletrônicos são degenerados para um mesmo n ? Explique sua resposta e defina o que é efeito de blindagem.
5. Os níveis de energia dos íons semelhantes ao hélio, quando um elétron está no estado fundamental e o outro num estado excitado ($n > 1$), podem ser dados, com certa aproximação, pela expressão $E = -13.6 \left[Z^2 + \frac{(Z-1)^2}{n^2} \right]$ eV.
 - (a) Discuta a plausibilidade desta expressão.
 - (b) Calcule os níveis de energia para o hélio quando $n = 2, 3$ e 4 e compare com os valores experimentais de $-58,08$ eV, $-56,04$ eV e $-55,37$ eV, respectivamente.
 - (c) Por que melhora a precisão da expressão à medida que n aumenta?
6. Qual é o momento angular orbital (na forma de múltiplos de \hbar) dos orbitais
 - (a) $1s$; (b) $3s$; (c) $3d$; (d) $2p$; (e) $3p$?
 - (f) Dê os números de nós radiais em cada caso.Qual é o elemento químico que possui a configuração
 - (g) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ e
 - (h) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$.
7. Escreva a configuração eletrônica de mais baixa energia (estado fundamental) para os átomos de C, N, Ne, Cu, Cu^+ , Cr e Cr^{++} .

8. Por que elementos da mesma coluna, e não da mesma fileira, da tabela periódica têm reatividade similar? Dê exemplos.
9. (a) Explique o princípio de exclusão de Pauli.
(b) Qual o papel da aproximação de Born-Oppenheimer na definição de uma estrutura molecular?
10. Esboce um gráfico da energia eletrônica em função da distância internuclear para uma molécula diatômica e identifique a distância de equilíbrio e a energia de dissociação.
11. O que caracteriza uma ligação σ e uma ligação π ? Qual combinação de orbitais dá origem a uma ligação σ e a uma ligação π ?
12. Mostre que $\psi_{sp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2s \pm 2p_z)$ é normalizado.
13. Em que consiste o processo de “hibridização” e porque ele é necessário? Quais são os tipos de hibridização do carbono e qual o ângulo formado entre as ligações químicas formadas por estes orbitais? Quais orbitais são combinados nos vários tipos de hibridização?
14. Qual o critério fundamental que deve ser obedecido para que seja possível combinar orbitais atômicos na formação de um orbital molecular?
15. Faça o diagrama de orbitais moleculares para o H_2 . Escreva a função de onda para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado.
16. Usando a teoria do orbital molecular, discuta porque não é possível a existência da molécula diatômica de hélio, He_2 .
17. Faça o diagrama de orbitais moleculares para as moléculas de N_2 , O_2 , F_2 . Qual a ordem de ligação destas moléculas?
18. As constantes de força para as moléculas diatômicas indo de B_2 até o F_2 são B_2 : $350 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, C_2 : $930 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, N_2 : $2260 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, O_2 : $1140 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ e F_2 : $450 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$. É a ordem que você esperava? Explique.
19. Utilizando a ordem de ligação b , julgue quais dos pares seguintes possuem maior energia de dissociação: N_2 e N_2^+ ; F_2 e F_2^+ .
20. Mostre explicitamente que um orbital s de um átomo de hidrogênio e um orbital p_x de um outro átomo de hidrogênio têm superposição zero.
21. O que é eletronegatividade e como ela se manifesta na teoria do orbital molecular? Qual a diferença qualitativa entre uma ligação σ na molécula de H_2 e na molécula de HF ?
22. Enuncie o princípio variacional.