



BC&T – BC0104 – Interações Atômicas e Moleculares
Segunda Lista de Exercícios

- 1) Escreva o operador de energia cinética em coordenadas esféricas. Escreva a equação de autovalores da parte angular deste operador em termos das auto-funções de L^2 e L_z , $Y(\theta, \Phi)$.
- 2) Escreva a equação de Schrödinger do átomo de H em coordenadas esféricas. Identifique cada termo do operador Hamiltoniano (energia cinética radial, energia cinética angular e energia potencial).
- 3) Dê uma olhada nas partes radiais das funções de onda do átomo de hidrogênio $R(r)$ (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 $r \rightarrow 0$?
- 5) Os orbitais de átomos multieletrônicos são degenerados para um mesmo n ? Explique sua resposta e defina o que é efeito de blindagem.
- 6) **[Atkins, 10.8a e 10.8b]** Qual o momento angular de um elétron nos seguintes orbitais: (a) 1s, (b) 3s e (c) 3d? Responda o mesmo para: (a) 4d, 2p, 3p.
- 9) Encontre a constante de normalização da função $\Psi(1,2) = (\phi_{1s}(1)\phi_{1p}(2) - \phi_{1s}(2)\phi_{1p}(1))$ onde $\phi_{1s}(1)$ e $\phi_{1p}(1)$ são funções normalizadas.
- 10) Escreva a configuração eletrônica de mais baixa energia para os elementos C, N, Ne, Cu, Cu^{+1} , Cr e Cr^{+2} .
- 11) Porque elementos da mesma coluna, e não da mesma fileira, da tabela periódica tem reatividade similar ? Dê exemplos.
- 12) Defina energia de ionização. Qual a energia de ionização para o átomo de H no seu estado fundamental ?