

2ª Lista de Exercícios de Interações Atômicas e Moleculares - 1º quadrimestre 2014

Questões

1-) Vamos considerar moléculas diatômicas heteronuclear CO . As energias de ionização de um elétron a partir dos orbitais atômicos de valência do átomo de carbono e do átomo de oxigênio, listados abaixo

Átomo	Orbital de Valência	Energia de Ionização ($\text{MJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)
O	2s	3,116
	2p	1,524
C	2s	1,872
	2p	1,023

(a) Use estes valores e construa os diagramas de energia para o CO . (b) Quais são as designações dos orbitais moleculares do CO ? (c) Qual é a configuração eletrônica do estado fundamental do CO ? (d) Qual é a ordem de ligação? O CO é paramagnético ou diamagnético?

2-) Mostre que o potencial de Lennard-Jones pode ser escrito como:

$$u(r) = \varepsilon \left(\frac{r^*}{r} \right)^{12} - 2\varepsilon \left(\frac{r^*}{r} \right)^6$$

Onde r^* é o valor de r no qual $u(r)$ tem um mínimo. Determine também a força devido ao potencial.

3-) A polarizabilidade por volume da água é de $1.48 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$. Calcule o momento de dipolo induzido nesta molécula quando aplicamos um campo de 1 kV/cm^{-1} .

4-) Estime o momento de dipolo de uma molécula de HF a partir das eletronegatividades dos elementos e expresse a resposta em Debye e $\text{C}\cdot\text{m}$

5-) Derive o limite assintótico da interação dipolo-dipolo e carga-dipolo. Escolha uma orientação conveniente.

6-) Descreva a formação de uma ligação de hidrogênio em termos de: (a) interações eletrostáticas e (b) orbitais moleculares. Como você identificaria o melhor modelo?

7-) (a) Em um experimento para a determinação da tensão superficial do metanol ($\rho = 791 \text{ kg m}^{-3}$ a 298 K) verificou-se que ele ascendeu a uma altura de $5,8 \text{ cm}$ em um tubo de

diametro interno igual a 0,20 mm. Qual e a tensao superficial a temperatura de 298 K?
(b) Com base nos modelos de interaçao molecular, explique o conceito de viscosidade e dê exemplos.

8-) Discuta se as seguintes moléculas são polares ou apolares. Em caso de serem polares, determine o momento de dipolo elétrico (vetor) associado a cada molécula.

- (a) H_2O ;
- (b) NH_3
- (c) CO_2
- (d) ClF
- (e) CCl_4

9-) Que interações moleculares contribuem para a formação, estabilidade térmica e resistência mecânica de um material polimérico?

10-) O polônio é um metal que existe somente como uma rede cúbica simples. Dado o comprimento do lado da célula unitária é 334,7 pm em 25°C , calcule a densidade do polônio.

11-) O cromo cristaliza em uma estrutura cúbica de corpo centrado com uma densidade de $7,20 \text{ g.cm}^{-3}$ a 20°C . Calcule o comprimento de uma célula unitária e a distância entre os planos sucessivos 110, 200 e 111.

12-) A densidade da prata a 20°C é $10,50 \text{ g.cm}^{-3}$ e tem uma célula unitária cúbica. Dado os primeiros ângulos de difração de Bragg são $\theta = 19,10^\circ, 22,17^\circ, 32,33^\circ, 38,82^\circ$ e $40,88^\circ$, ache o tipo de célula unitária e seu tamanho. Seno o comprimento de onda da radiação incidente de $\lambda = 154,433 \text{ pm}$.

13-) A estrutura do CuSO_4 (s) é ortorrômbico com dimensões da célula unitária $a = 488,2 \text{ pm}$, $b = 665,7 \text{ pm}$, $c = 831,6 \text{ pm}$. Calcule o valor de θ , o ângulo de primeira ordem para a difração de Bragg, dos planos 100, os planos 110, e os planos 111 se CuSO_4 (s) é irradiado com raios-x com $\lambda = 154,433 \text{ pm}$.

14-) A largura da banda proibida que separa a banda de valência da banda de condução do silício é 1,14 eV à temperatura ambiente. Qual é o comprimento de onda de um fóton capaz de excitar um elétron do topo da banda de valência para a base da banda de condução?

15-) Um fóton com comprimento de onda de $3,35 \mu\text{m}$ tem exatamente a energia suficiente para excitar um elétron da banda de valência para a banda de condução de um cristal de sulfeto de chumbo. (a) Determine a largura da banda proibida do sulfeto de chumbo. (b) Determine a temperatura T para qual kT é igual a largura da região proibida.

16-)(a) Explique o que são condutores tipo n e p? (b) Que tipo de semicondutor é obtido quando o silício é dopado com alumínio? (c) Que tipo de semicondutor é obtido quando o silício é dopado com fósforo? Justifique a sua resposta com base nas configurações eletrônicas dos elementos envolvidos.

17-) Um forma de determinar a concentração de portadores em semicondutores e metais é por meio do efeito Hall. Uma placa de alumínio de largura $w = 1,5$ cm e com espessura $t = 250 \mu\text{m}$ é submetida a um campo magnético uniforme de $0,55$ T perpendicular ao plano da placa é percorrida por uma corrente de 25 A, uma diferença de potencial de $1,64 \mu\text{V}$ é medida entre os dois lados da placa. Qual é a concentração de elétrons no alumínio e quantos portadores existem, em média, por átomo.

18-) Por meio de teoria de bandas explique a diferença entre metais, isolantes e semicondutores.

19-) O gálio tem três elétrons de valência. Se o gálio é usado como impureza aceitadora no germânio, determine (a) a energia de ionização; (b) o raio orbital do buraco. A massa efetiva dos buracos no germânio é $0,34m_e$.