

Interações Atômicas e Moleculares - 2014.2

Lista 2: Interações Moleculares, Líquidos, Sólidos

1. Explique a origem do momento de dipolo permanente e da polarizabilidade de uma molécula.
2. D. D. Nelson, G. T. Fraser e W. Klemperer (*Science* 238, 1670 (1987)) examinaram vários complexos de amônia em fase gasosa, fracamente ligados, à procura de exemplos nos quais os átomos de H do NH_3 formassem ligações de hidrogênio. De fato, não encontraram nenhum. Por exemplo, eles encontraram que o complexo de NH_3 e CO_2 possui o átomo de carbono próximo ao de nitrogênio (299 pm); a molécula de CO_2 está localizada a ângulos retos relativamente a “ligação” C-N e os átomos de H de NH_3 estão apontando na direção oposta ao CO_2 . O momento de dipolo permanente deste complexo é reportado como 1,77 D. Qual a magnitude das cargas parciais do dipolo?
3. Estime o momento de dipolo de uma molécula de HF a partir das eletronegatividades dos elementos e expresse a resposta em Debye e Cm.
4. Discuta se as seguintes moléculas são polares ou apolares. Em caso de serem polares, determine a direção do momento de dipolo elétrico (vetor) associado a cada molécula: (a) H_2O , (b) NH_3 , (c) CO_2 , (d) ClF e (e) CCl_4 .
5. O volume de polarizabilidade da água e de $1.48 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3$. Calcule o momento de dipolo induzido nesta molécula quando aplicamos um campo de 1 kV/cm.
6. Derive o limite assintótico da interação dipolo-dipolo e carga-dipolo. Escolha uma orientação conveniente.
7. Descreva a formação de uma ligação de hidrogênio em termos de: (a) interações eletrostáticas e (b) orbitais moleculares. Como você identificaria o melhor modelo?
8. Quais interações podem ocorrer entre duas moléculas de água? São elas na sua maioria atrativas ou repulsivas? Explique.
9. (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 cm em um tubo de diâmetro interno igual a 0.20 mm. Qual é a tensão superficial

- à temperatura de 298 K?
- (b) Com base nos modelos de interação molecular, explique o conceito de viscosidade e dê exemplos.
- Pontos equivalentes na rede cristalina dentro da célula unitária de uma rede cristalina possuem vizinhanças idênticas. Quais pontos dentro da célula unitária cúbica de face centrada são equivalentes ao ponto $(\frac{1}{2}, 0, 0)$? E para uma célula cúbica de corpo centrado, quais são equivalentes ao ponto $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$?
 - O comprimento da ligação C-C no diamante é 154.45 pm. Se considerarmos a estrutura do diamante como sendo estrutura de empacotamento fechado de esferas duras cujos raios são iguais à metade do comprimento da ligação, qual deveria ser a sua densidade? A rede do diamante é de fato cúbica de face centrada, e a sua densidade é 3.516 g/cm³. Como explicar esta discrepância?
 - O polônio é um metal que existe somente como uma rede cúbica simples. Dado que o comprimento do lado da célula unitária é 334.7 pm em 25 °C, calcule a densidade do polônio.
 - O cromo cristaliza em uma estrutura cúbica de corpo centrado com uma densidade de 7.20 g/cm³ a 20 °C. Calcule o comprimento de uma célula unitária.
 - (a) Quantos átomos temos na célula unitária cúbica fcc (cúbico de face centrada) e bcc (cúbico de corpo centrado)? Justifique suas respostas.
(b) Qual o número de primeiros vizinhos para um átomo nas geometrias fcc e bcc? Ilustre seus resultados.
 - Calcule o fator de empacotamento para (a) célula primitiva cúbica; (b) célula unitária ccc; (c) célula unitária cfc.
 - Quantos átomos de Cl e de Na temos na célula unitária de NaCl? Qual a carga total da célula unitária? Justifique sua resposta.
 - Derive as relações para $\gamma = r_{\text{menor}}/r_{\text{maior}}$ que definem as regiões de estabilidade para as estruturas de sais iônicos similares ao NaCl e ao CsCl.
 - 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?
 - Um fóton com comprimento de onda de 3.35 μm 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 à largura da região proibida.

20. (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.
21. Por meio da teoria de bandas explique a diferença entre metais, isolantes e semicondutores.