

3ª Lista de Exercícios de Interações Atômicas e Moleculares - 1º quadrimestre 2016

Questões

- 1-) O que são forças intramoleculares e intermoleculares
- 2-) Explique e discuta as forças intramoleculares e intermoleculares em gases, líquidos e sólidos.
- 3-) O que são as forças de Van der Waals? Quais os tipos e quais as características destas forças.
- 4-) (a) Discuta as propriedades elétricas de moléculas. (b) O que são: dipolos elétricos, polaridade molecular, polarização. Qual a relação entre o índice de refração e polarização.
- 5-) Descreva procedimentos experimentais para determinação do momento de dipolo elétrico de uma molécula
- 6-) O que são os n-polos elétricos? Quais são os tipos? Esboce arranjos de cargas elétricas que correspondem a um monopolo, dipolo, quadrupolo, octopolo, e discuta as razões para as diferentes dependências dos campos elétricos com as distâncias entre as cargas.
- 7-) Explique as propriedades microscópicas em líquidos. O que é uma função de distribuição radial e para que serve na descrição de sistemas condensados?
- 8-) Descreva as teorias que tratam os movimentos moleculares em líquidos..
- 9-) Classifique as moléculas (ClF_3 , O_3 , H_2O_2 , SO_3 , XeF_4 , SF_4) quanto à polaridade. Justifique as respostas.
- 10-) Calcule a resultante de dois momentos de dipolo, com módulos de 1,5D e 0,8D, que fazem entre si um ângulo de $109,50^\circ$.
- 11-) A polarizabilidade volumar de H_2O é $1,48 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$. Calcule o momento de dipolo da molécula (além do momento de dipolo permanente) induzido por um campo elétrico externo de intensidade 1000 V/cm .

12-) Discuta as relações entre as propriedades termodinâmicas nos líquidos

13-) Discuta as diferenças e semelhanças em termos das ligações e estrutura em: a) líquidos; b) sólidos metálicos; c) cristais iônicos;

14-) Diamante é um dos materiais mais duros conhecido. Explique isto em termos de sua estrutura.

15-) Que tipo de radiação é mais adequado para o estudo de sólidos e cristais e por quê?

16-) Explique por que o saldo de forças atrativas entre moléculas polares diminuem quando a temperatura aumenta. Compare isto com a dependência da temperatura da polarização molar de substâncias polares sob a ação de um campo externo

17-) (a) Discuta os princípios da teoria de bandas. (b) Como o caráter iônico de um sólido iônico é refletido no sistema de bandas? (c) O que são sólidos isolantes, condutores e semicondutores. (d) Quais as características destes materiais em termos da estrutura eletrônica?

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

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

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

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

20-) 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 que são: $\theta = 19,10^\circ$; $22,17^\circ$; $32,33^\circ$; $38,82^\circ$; $40,88^\circ$, ache o tipo de célula unitária e seu tamanho. Sendo o comprimento incidente é $\lambda = 154,433 \text{ pm}$.

21-) Mostre que a equação de Bragg pode ser escrita como:

$$\text{sen}^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2)$$

O grafite é conhecido por cristalizar em uma estrutura cúbica, suponha que uma amostra de pó de grafite tenha os seguintes ângulos de reflexão: $15,66^\circ$; $18,17^\circ$; $26,13^\circ$;

$\text{sen}^2\theta$	Divisão por 0,0729	Conversão do Valor Inteiro	hkl
0,0729	1	3	111
0,0972	1,33	4	200

Tabela 1: Ângulos de Difração do Grafite

31,11°; 32,71° e 38,59° usando raios x com $\lambda=154,433$ pm, complete a tabela abaixo, determine o tipo de célula unitária e determine seu comprimento.

22-) O ângulo de difração de Bragg de segunda ordem do plano 222 de um cristal de potássio é $\theta=27,43^\circ$, quando o comprimento de onda da radiação-x é $\lambda=70,926$ pm. Dado que o potássio existe em uma rede cúbica de corpo centrado, determine o comprimento da célula unitária e a densidade do cristal.

23-) Demonstre a lei de Bragg